

Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Escola de Engenharia  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil

**Implementação numérica de um modelo de  
plasticidade cristalina para estado plano de  
deformações e aplicação ao estudo de trinca em  
monocristal**

**Guilherme Fiorin Fornel**

Porto Alegre  
2018

GUILHERME FIORIN FORNEL

**IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DE UM  
MODELO DE PLASTICIDADE CRISTALINA  
PARA ESTADO PLANO DE DEFORMAÇÕES E  
APLICAÇÃO AO ESTUDO DE TRINCA EM  
MONOCRISTAL**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia.

Porto Alegre

2018

### CIP - Catalogação na Publicação

Fiorin Fornel, Guilherme

Implementação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal / Guilherme Fiorin Fornel. -- 2018.

104 f.

Orientador: Eduardo Bittencourt.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Porto Alegre, BR-RS, 2018.

1. plasticidade cristalina. 2. fratura em monocristais. 3. elementos finitos. I. Bittencourt, Eduardo, orient. II. Título.

GUILHERME FIORIN FORNEL

IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DE UM MODELO DE  
PLASTICIDADE CRISTALINA PARA ESTADO PLANO DE  
DEFORMAÇÕES E APLICAÇÃO AO ESTUDO DE TRINCA  
EM MONOCRISTAL

Esta dissertação de mestrado foi julgada adequada para a obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA, Área de Concentração Estruturas, e aprovada em sua forma final pelo professor orientador e pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Porto Alegre, 31 de outubro de 2018

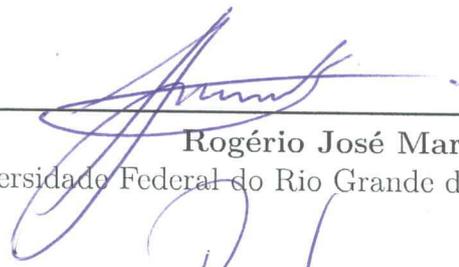


Prof. Eduardo Bittencourt  
Dr. pela Universidade Federal  
do Rio Grande do Sul  
Orientador

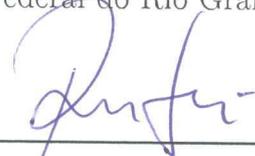


Prof. Nilo Cesar Consoli  
Coordenador do PPGEC/UFRGS

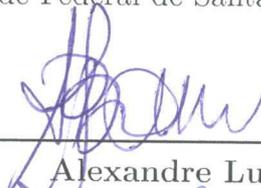
BANCA EXAMINADORA



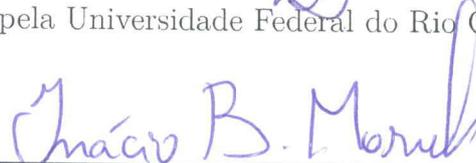
Rogério José Marczak  
Dr. pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul



Rodrigo Rossi  
Dr. pela Universidade Federal de Santa Catarina



Alexandre Luis Braun  
Dr. pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul



Inácio Benvegnu Morsch  
Dr. pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul

# AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Governo Brasileiro pelas bolsas de estudo através da Capes e do CNPq que proporcionaram dedicação exclusiva ao trabalho.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Eduardo Bittencourt, pelos ensinamentos, confiança depositada e, principalmente, pela paciência que teve ao atender meu tempo e meus anseios.

Aos meus pais, pelo amor, incentivo e dedicação.

Aos colegas e amigos do PPGEC/UFRGS, pela convivência frutífera e pelos ótimos momentos que me proporcionaram.

Ao amigo Felipe Quevedo pelos grandes momentos de reflexão “metafísica” e pela leitura de parte do trabalho.

Ao amigo Eduardo Braun pela ótima convivência e grande auxílio na fase final do trabalho.

## RESUMO

A abordagem clássica de teoria da plasticidade descrevem de maneira eficaz o comportamento mecânico macroscópico de sólidos policristalinos, porém não descrevem os fenômenos que ocorrem na microestrutura do material. Isto dificulta o entendimento das particularidades microestruturais em problemas fortemente dependentes da estrutura cristalina, como efeitos de escala no endurecimento, ductilidade e fratura. Entre as abordagens utilizadas no âmbito da engenharia para modelar o comportamento elastoplástico de cristais metálicos se destacam as teorias de plasticidade cristalina. No presente trabalho é feita a implementação numérica de um modelo de plasticidade que incorpora a anisotropia da microestrutura cristalina dos metais. São discutidos tópicos pertinentes ao assunto, tais como sistemas cristalinos, discordâncias em monocristais metálicos, limite elástico de monocristais, elastoplasticidade cristalina e fratura em cristais. A partir de um modelo de equações em plasticidade cristalina para grandes deformações proposto por Asaro (1983), é proposta uma particularização para pequenas deformações e estado plano de deformações (EPD). Para tal, é considerada uma orientação específica de cristais com estrutura cúbica de face centrada (CFC), proporcionando o tratamento do problema através de três sistemas de deslizamento cristalográficos efetivos. São implementadas algumas leis de endurecimento propostos pela literatura no tema. Condições relativas à solubilidade do sistema de equações lineares que descreve a relação constitutiva cristalina são verificadas. Utiliza-se o método dos elementos finitos como ferramenta de discretização numérica do modelo matemático, com a implementação em elementos quadriláteros bilineares. São propostos modelos de mono-elementos quadriláteros sob deformação uniforme para verificação da relação constitutiva, para material perfeitamente plástico, endurecível e para variação da orientação do cristal em EPD. Para a validação do modelo numérico é proposta uma aplicação a uma trinca sob modo de tração em um monocristal metálico de estrutura CFC e comparação com os resultados analíticos do problema aproximado à ponta da trinca por Rice (1987) e Drugan (2001). Conclui-se que a relação constitutiva cristalina é invertível e bem condicionada para incrementos pequenos de deformação. Além disso, os resultados da simulação de elementos finitos aproximam-se das soluções por aproximação assintótica à ponta da trinca, sendo as discrepâncias devidas em primeiro lugar porque as soluções de Rice (1987) e Drugan (2001) não incorporam a dependência do raio.

**Palavras-chaves:** plasticidade cristalina. fratura em monocristais. elementos finitos.

# ABSTRACT

The classical approaches of plasticity theory effectively describe the macroscopic mechanical behavior of polycrystalline solids, but they do not describe the phenomena that occur in the microstructure of the material. This makes difficult to understand microstructural particularities in problems strongly dependent on the crystalline structure, such as scale effects on hardening, ductility and fracture. Among the approaches used in engineering to model the elastic-plastic behavior of metallic crystals the theories of crystalline plasticity stand out. In this work the numerical implementation of a plasticity model which incorporates the crystalline microstructure anisotropy of metals is performed. Topics relevant to the subject are discussed, such as crystalline systems, dislocation in metallic single-crystals, elastic limit of single-crystals, crystal elastoplasticity and fracture in crystals. From a model of equations in crystal plasticity for large deformations proposed by Asaro (1983) a small strains and plane strain particularization is proposed. For this, a specific orientation of crystals with face centered cubic structure (FCC) is considered, providing the treatment of the problem through three effective crystallographic slip systems. Some hardening laws proposed in the subject literature are implemented. Conditions related to the solubility of the system of linear equations describing the crystalline constitutive relation are verified. The finite element method is used as numerical discretization tool of the mathematical model, with implementation of bilinear quadrilateral elements. Quadrilateral single-elements under uniform strains state are proposed to verify the constitutive equation for perfectly plastic, hardenable material and for variation of crystal orientation in plane strains. To validate the numerical model, it is proposed a application to a tensile crack in a FCC metallic single-crystal and comparison with the analytical results of the problem approximate asymptotically to de crack tip by Rice (1987) and Drugan (2001). It is concluded that the crystalline constitutive relation is invertible and well conditioned for small deformation increments. In addition, the finite element simulation results approximate the solutions by crack tip asymptotic approximation, the discrepancies due in the first place because the solutions of Rice (1987) and Drugan (2001) do not incorporate the dependence of the radius.

**Key-words:** crystal plasticity. fracture in single-crystals. finite element method.

# LISTA DE ILUSTRAÇÕES

|  |    |
|--|----|
| Figura 1 – Lâminas de turbinas aeronáuticas: direcionalmente solidificadas (esquerda), policristalinas convencionais (centro) e monocristalínicas (direita). Fonte: Golinval (2018). . . . .   | 2  |
| Figura 2 – As três redes cúbicas. As células que aparecem na Figura são as convencionais. Fonte: elaborado pelo autor. . . . .   | 6  |
| Figura 3 – Quadro relativo à classificação de algumas propriedades físicas de cristais em <i>insensíveis à estrutura</i> e <i>sensíveis à estrutura</i> . Fonte: Dieter (1976, p. 86). . . . .   | 9  |
| Figura 4 – Diagrama de um corte na superfície de um policristal (a) antes e (b) após a deformação plástica. O tracejado indica as orientações cristalográficas e a seta dupla indica a direção de sollicitação. Fonte: Ewing e Rosenhain (1900, p. 362). . . . .   | 10 |
| Figura 5 – Micrografia óptica de um policristal de chumbo após a deformação. Fonte: Ewing e Rosenhain (1900, p. 362). . . . .  | 11 |
| Figura 6 – Sistemas de deslizamento em um cristal CFC. O triedro $\{x_1, x_2, x_3\}$ define o sistema de coordenadas vinculado ao cristal utilizado para numeração dos direções cristalográficas em termos dos índices de Miller. Os planos de deslizamento são os planos diagonais gerados pelos triângulos em cinza, identificados por seus vetores diretores. As direções de deslizamento correspondem às direções definidas pelas arestas dos triângulos. Fonte: elaborado pelo autor. . . . .   | 12 |
| Figura 7 – Diagrama esquemático de um monocristal de alumínio orientado para máxima tensão projetada no sistema $(\bar{1}11)[110]$ , conforme as experiências de Taylor e Elam (1923, 1925). (a) Espécime indeformado. (b), (c) Rotação relativa entre o eixo de tração e o sistema primário. (d) Deslizamento duplo nos sistemas primário e conjugado. (e) Setor de projeção estereográfica de Taylor e Elam (1923) evidenciando a rotação do eixo de tração relativamente a rede cristalina; marcados os pontos de diversos níveis de deformação. Fonte: Asaro (1983, p. 9). . . . . | 14 |
| Figura 8 – Dois planos de átomos sob cisalhamento. Fonte: Khan e Huang (1995, p. 318). . . . .   | 16 |
| Figura 9 – Potencial interatômico em um cristal perfeito. Fonte: Taylor (1934, p. 371). . . . .  | 18 |
| Figura 10 – Potencial interatômico próximo a uma discordância. Fonte: Taylor (1934, p. 371). . . . .   | 19 |

|   |    |
|---|----|
| Figura 11 – Potencial interatômico próximo a uma discordância sob cisalhamento.<br>Fonte: Taylor (1934, p. 374). . . . .  | 20 |
| Figura 12 – Cilindro elástico perfurado axialmente com discordância de aresta. Fonte:<br>Taylor (1934, p. 376). . . . .   | 20 |
| Figura 13 – Discordâncias (a) de aresta e (b) helicoidal. Fonte: Sólyom (2007, p.<br>284-285). . . . .  | 21 |
| Figura 14 – Discordância mista. Fonte: Sólyom (2007, p. 287). . . . .   | 22 |
| Figura 15 – Representação esquemática da operação de uma fonte de Frank-Reed.<br>Fonte: Dieter (1976, p. 185). . . . .  | 24 |
| Figura 16 – Bandas de deslizamento duplo em um monocristal de <i>latão alfa</i> para<br>diferentes graus de deformação. Fonte: Piercy, Cahn e Cottrell (1955, p.<br>335). . . . .   | 25 |
| Figura 17 – Micrografia de um grão de policristal alumínico estendido a 10%. São<br>observadas bandas devidas a deslizamento não-uniforme no interior de<br>um grão monocristalino em cinco famílias de linhas de deslizamento.<br>Fonte: Boas e Ogilvie (1954, p. 657). . . . .  | 25 |
| Figura 18 – Decomposição do gradiente de deformações. À esquerda a configuração<br>de referência $\mathcal{B}$ , à direita a configuração intermediária $\mathcal{B}'$ e acima a<br>configuração atual $\mathcal{B}^*$ . Fonte: Asaro (1983, p. 38). . . . .  | 27 |
| Figura 19 – Uma das possíveis orientações do plano de solitação (em cinza) em<br>estado plano de deformações em relação à estrutura de um monocristal<br>CFC. . . . .   | 35 |
| Figura 20 – Variação de $H(\gamma)$ com $\gamma$ para endurecimentos hiperbólico e de potência  | 36 |
| Figura 21 – Escalas relevantes na resposta à fratura em um componente macroscó-<br>pico. Fonte: Van der Giessen e Needleman (2002, p. 143). . . . .   | 38 |
| Figura 22 – Orientação do plano de carregamento em relação às direções crista-<br>lográficas em monocristal CFC. $\{x_1, x_2\}$ definem o plano e o triedro<br>$\{X, Y, Z\}$ define o sistema de coordenadas vinculado ao cristal (utilizado<br>para numeração dos sistemas cristalográficos em termos dos índices de<br>Miller). Fonte: Rice (1987, p. 318). . . . . | 40 |
| Figura 23 – Numeração adotada para os sistemas de deslizamento efetivos. . . . .  | 41 |
| Figura 24 – Quadro representativo dos vetores diretores dos sistemas de deslizamento<br>cristalográficos e efetivos 1 e 2 para o cristal CFC. . . . .   | 42 |
| Figura 25 – Superfície de escoamento para um cristal CFC em EPD. Fonte: Rice<br>(1987, p. 318). . . . .   | 43 |
| Figura 26 – Campo de tensões para trinca estacionária. Fonte: Rice (1987, p. 322).  | 44 |
| Figura 27 – Forma do campo de tensões na ponta da trinca de um monocristal CFC<br>com impedimento ao cisalhamento por dobra. Fonte: Drugan (2001, p.<br>2165). . . . .  | 47 |

|  |    |
|--|----|
| Figura 28 – Bandas elásticas dos sistemas de deslizamento efetivos (em branco, delimitadas por linha tracejada) e regiões fora das bandas (em cinza). . . . .  | 52 |
| Figura 29 – Orientação dos sistemas efetivos e sentido da rotação arbitrária $\varphi$ . . . . .   | 53 |
| Figura 30 – Variação do determinante da matriz constitutiva $\mathbb{N}$ em função de $\gamma$ para diferentes coeficientes de auto-endurecimento e variações hiperbólica e de potência. O determinante é avaliado para todas as combinações de sistemas operantes. . . . .  | 56 |
| Figura 31 – Variação do número de condicionamento da matriz constitutiva $\mathbb{N}$ segundo a norma euclidiana em função de $\gamma$ para diferentes coeficientes de auto-endurecimento e variações hiperbólica e de potência. O condicionamento é avaliado para todas as combinações de sistemas operantes. . . . . | 57 |
| Figura 32 – Mono-elementos quadriláteros bilineares de 4 nós sob deslocamentos $\Delta$ . . . . .  | 60 |
| Figura 33 – Mono-elemento sob tração uniforme com $\epsilon_{11} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001. $\varphi = 0^\circ$ . . . . .  | 61 |
| Figura 34 – Mono-elemento sob cisalhamento puro com $\epsilon_{12} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001. $\varphi = 0^\circ$ . . . . .  | 61 |
| Figura 35 – Quadro de: mono-elemento de tração uniforme com $\epsilon_{11} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Resumo para o nó 3 com incrementos de deslocamentos de $0.001\Delta$ . $\varphi = 0^\circ$ . . . . .   | 62 |
| Figura 36 – Quadro de: mono-elemento sob cisalhamento puro $\epsilon_{12} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Resumo para o nó 3 com incrementos de deslocamentos de $0.001\Delta$ . $\varphi = 0^\circ$ . . . . .  | 62 |
| Figura 37 – Mono-elemento. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001. $\varphi = 0^\circ$ . . . . .   | 63 |
| Figura 38 – mono-elemento. Tração uniforme ( $\epsilon_{11} = 0.005$ ). Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001. $\varphi = 30^\circ$ . . . . .   | 64 |
| Figura 39 – Mono-elemento sob tração uniforme com $\epsilon_{11} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001. $\varphi = 45^\circ$ . . . . .   | 64 |
| Figura 40 – Mono-elemento sob tração uniforme $\epsilon_{11} = 0.005$ . Endurecimento linear. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.000. $\varphi = 30^\circ$ . . . . .   | 65 |
| Figura 41 – Mono-elemento sob cisalhamento puro com $\epsilon_{12} = 0.005$ ). Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001. $\varphi = 30^\circ$ . . . . .  | 65 |

|  |    |
|--|----|
| Figura 42 – Mono-elemento sob cisalhamento puro com $\epsilon_{12}=0.005$ ). Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001. $\varphi = 45^\circ$ . . . . .  | 66 |
| Figura 43 – Mono-elemento sob cisalhamento puro com $\epsilon_{12}=0.005$ . Endurecimento linear. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.000. $\varphi = 30^\circ$ . . . . .   | 66 |
| Figura 44 – Domínio físico do problema, $1000\mu m \times 1000\mu m$ ; $u_b$ denota o campo de deslocamentos impostos no contorno. . . . .   | 67 |
| Figura 45 – Domínio computacional: malha e condições de contorno do problema. $F_i$ e $U_i$ são das componentes $i$ do vetor de forças e vetor de deslocamentos respectivamente. . . . .   | 68 |
| Figura 46 – Detalhe da malha próximo à ponta da trinca. A ponta da trinca situa-se no ponto médio da aresta da <i>janela refinada</i> . . . . .  | 68 |
| Figura 47 – (a)-(d) Campos de tensões na ponta da trinca; o retângulo delimita a janela refinada; $s_{ij}$ são as componentes desviadoras das tensões. (e)-(g) Isovalores das componentes $\epsilon_{ij}^p$ na janela refinada (zonas elásticas em branco). . . . .  | 70 |
| Figura 48 – Comparação das tensões obtidas na simulação numérica com os valores da Tabela 2 para os raios de $1,8\mu m$ , $2,8\mu m$ e $3,8\mu m$ a partir da ponta da trinca. . . . .   | 71 |
| Figura 49 – Mapas de isovalores dos deslizamentos cristalinos para (a) $\gamma^{(1)}$ , (b) $\gamma^{(2)}$ e (c) $\gamma^{(3)}$ . . . . .  | 72 |
| Figura 50 – Trajetória no espaço de tensões para os nós 4315 ( $r \approx 2,8\mu m$ , $\theta \approx 30^\circ$ , Setor A), 4507 ( $r \approx 2,8\mu m$ , $\theta \approx 70^\circ$ , Setor B), 4539 ( $r \approx 2,8\mu m$ , $\theta \approx 110^\circ$ , Setor C) e 4521 ( $r \approx 2,8\mu m$ , $\theta \approx 150^\circ$ , Setor D). . . . . | 72 |
| Figura 51 – Transformações de simetria em moléculas; eixo de simetria de ordem 2 (esquerda-acima), eixo de simetria de ordem 3 (centro-acima), eixo de rotação-reflexão de ordem 4 (direita-acima), plano de simetria (esquerda-abixo) e centro de simetria (direita-abaixo). Fonte: Landau, Akhiezer e Lifshitz (1967, p. 116-117). . . . .       | 81 |
| Figura 52 – Diagrama da simetria de redes cristalinas. Fonte: Landau e Lifshitz (1984, p. 405). . . . .  | 83 |
| Figura 53 – Elementos de simetria de um sistema $\mathbf{O}_h$ . Fonte: Landau e Lifshitz (1967, p. 345-346) . . . . .   | 84 |
| Figura 54 – As 14 redes de Bravais. Fonte: Landau e Lifshitz (1984, p. 406). . . . .   | 85 |
| Figura 55 – Células unitárias das estruturas CCC e CFC. Fonte: Landau e Lifshitz (1984, p. 408). . . . .   | 86 |

## LISTA DE TABELAS

|   |    |
|---|----|
| Tabela 1 – Correspondência entre sistemas de deslizamento cristalográficos e sistemas efetivos. Fonte: Niordson e Kysar (2014, p. 41). . . . .  | 41 |
| Tabela 2 – Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Figura 26. Fonte: Rice (1987, p. 322). . . . .   | 46 |
| Tabela 3 – Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Figura 27 com $\theta_2 = 98.0495^\circ$ e $\theta_3 = 125.264^\circ$ . Fonte: Drugan (2001, p. 2166). . . . .   | 48 |
| Tabela 4 – Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Figura 27 com $\theta_2 = \theta_3 = 111.675^\circ$ . Fonte: Drugan (2001, p. 2167). . . . .   | 48 |
| Tabela 5 – Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Figura 27 com $\theta_2 = 90^\circ$ , $\theta_3 = 125.264^\circ$ e um salto de tensão através da descontinuidade $\theta_3 = 125.264^\circ$ . Fonte: Drugan (2001, p. 2168). . . . . | 48 |
| Tabela 6 – Parâmetros do material (crystal de uma liga de cobre-alumínio). . . . .  | 55 |
| Tabela 7 – Número e parâmetros de redes para cada sistema cristalino. Fonte: Kittel (2006, p. 9). . . . .   | 85 |

# LISTA DE SÍMBOLOS

|  |  |
|--|--|
| $uvw$  | Índices de Miller para uma direção                               |
| $(uvw)$  | Índices de Miller para um plano                                  |
| $\langle uvw \rangle$                                | Índices de Miller para uma família de direções                   |
| $\{uvw\}$  | Índices de Miller para uma família de planos                     |
| $\mathbf{m}^{(\alpha)}$                              | Vetor diretor do plano cristalográfico $\alpha$                  |
| $\mathbf{s}^{(\alpha)}$                              | Vetor diretor da direção cristalográfica $\alpha$                |
| $\{\mathbf{m}^{(\alpha)}, \mathbf{s}^{(\alpha)}\}$   | Sistema de deslizamento $\alpha$ na configuração de referência   |
| $\{\mathbf{m}^{*(\alpha)}, \mathbf{s}^{*(\alpha)}\}$ | Sistema de deslizamento $\alpha$ na configuração atual           |
| $\mathbf{F}$   | Gradiente de deformações   |
| $\mathbf{F}^*$                                       | Parcela elástica e rotacional do gradiente de deformações        |
| $\mathbf{F}^p$                                       | Parcela plástica do gradiente de deformações                     |
| $\mathbf{L}$   | Gradiente de velocidades   |
| $\mathbf{L}^*$                                       | Parcela elástica e rotacional do gradiente de velocidades        |
| $\mathbf{L}^p$                                       | Parcela plástica do gradiente de velocidades                     |
| $\mathbf{D}$   | Tensor velocidade de deformação                                  |
| $\mathbf{\Omega}$                                    | Tensor velocidade de rotação                                     |
| $\mathbf{D}^*$                                       | Parcela elástica e rotacional do tensor velocidade de deformação |
| $\mathbf{D}^p$                                       | Parcela plástica do tensor velocidade de deformação              |
| $\mathbf{\Omega}^*$                                  | Parcela elástica e rotacional do tensor velocidade de rotação    |
| $\mathbf{\Omega}^p$                                  | Parcela plástica do tensor velocidade de rotação                 |
| $\mathbf{P}^{(\alpha)}$                              | Tensor de Schmid   |
| $\mathbf{\bar{P}}^{*(\alpha)}$                       | Taxa de Jaumann do tensor de Schmid medida na configuração atual |
| $\mathbf{W}^{(\alpha)}$                              | Contraparte antissimétrica do tensor de Schmid                   |
| $\mathbf{E}$   | Tensor de pequenas deformações                                   |

|                          |  |
|--------------------------|--|
| $\epsilon_{ij}$          | Tensor de pequenas deformações (em notação indicial)                             |
| $\sigma$                 | Tensor de tensões de Cauchy  |
| $\tau$                   | Tensor de tensões de Kirchoff na configuração de referência                      |
| $\tau^*$                 | Tensor de tensões de Kirchoff no referencial que rotaciona com a rede cristalina |
| $\dot{\tau}$             | Taxa de Jaumann da tensão de Kirchoff medida na configuração de referência       |
| $\dot{\tau}^*$           | Taxa de Jaumann da tensão de Kirchoff medida na configuração atual               |
| $\beta^{(\alpha)}$       | Tensor de rotação da rede cristalina para o sistema $\alpha$                     |
| $F$                      | Energia livre  |
| $\mathbf{C}$             | Tensor constitutivo elástico   |
| $\mathbf{C}^{\text{ep}}$ | Tensor constitutivo elastoplástico   |
| $\lambda, \mu$           | Parâmetros de Lamé   |
| $E$                      | Módulo de elasticidade   |
| $\nu$                    | Coefficiente de Poisson  |
| $G$                      | Módulo de cisalhamento   |
| $\tau^{(\alpha)}$        | Tensão projetada no sistema $\alpha$   |
| $\tau_c^{(\alpha)}$      | Tensão projetada crítica no sistema $\alpha$                                     |
| $\gamma^{(\alpha)}$      | Deslizamento no sistema $\alpha$   |
| $h_{\alpha\beta}$        | Tensor módulo de endurecimento (em notação indicial)                             |
| $q$                      | Fator de endurecimento latente   |
| $H(\gamma)$              | Função de auto-endurecimento   |
| $\beta^{(\alpha)}$       | Fator do sistema efetivo $\alpha$  |
| $N_{\alpha\beta}$        | Tensor constitutivo cristalino para estado plano de deformações                  |
| sgn                      | Função sinal   |

# SUMÁRIO

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>  | <b>1</b>  |
| 1.1      | Contextualização   | 1         |
| 1.2      | Objetivos  | 3         |
| 1.2.1    | Objetivo Principal   | 3         |
| 1.2.2    | Objetivos Específicos  | 3         |
| 1.3      | Metodologia  | 4         |
| 1.4      | Organização do texto   | 4         |
| 1.5      | Notação matemática   | 5         |
| <b>2</b> | <b>Microestrutura dos metais</b>                                       | <b>6</b>  |
| 2.1      | Natureza cristalina da matéria   | 6         |
| 2.1.1    | Propriedades macroscópicas   | 6         |
| 2.1.2    | Índices de Miller  | 7         |
| 2.1.3    | Ligações químicas e estruturas cristalinas de metais                   | 8         |
| 2.2      | Defeitos de rede   | 8         |
| <b>3</b> | <b>Deformação plástica em cristais metálicos</b>                       | <b>10</b> |
| 3.1      | Primeiros estudos  | 10        |
| 3.2      | Observações sobre o endurecimento por deformação                       | 13        |
| 3.3      | Limite elástico de um cristal metálico perfeito                        | 16        |
| 3.4      | Discordâncias  | 17        |
| 3.4.1    | Desvios à lei de Schmid, interação entre discordâncias e endurecimento | 22        |
| 3.4.2    | Medições do endurecimento latente                                      | 23        |
| 3.4.3    | Deslizamento não uniforme em grãos de policristais                     | 24        |
| <b>4</b> | <b>Elastoplasticidade em meios cristalinos</b>                         | <b>26</b> |
| 4.1      | Cinemática da deformação em monocristais                               | 26        |
| 4.2      | Relação constitutiva   | 29        |
| 4.3      | Lei de Schmid e endurecimento independente da taxa de deformação       | 31        |
| 4.4      | Tensor constitutivo elástico em pequenas deformações                   | 34        |
| 4.5      | O módulo de endurecimento $h_{\alpha\beta}$                            | 35        |
| 4.5.1    | Endurecimento de Taylor  | 35        |
| 4.5.2    | Endurecimento de Hutchinson-Asaro                                      | 36        |
| <b>5</b> | <b>Fratura em cristais metálicos</b>                                   | <b>37</b> |
| 5.1      | Multiescala da fratura em metais                                       | 37        |
| 5.1.1    | Escala materiais relevantes em fratura                                 | 37        |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 5.1.1.1  | Escala da zona plástica . . . . .  | 38        |
| 5.1.1.2  | Escala dos grãos . . . . .   | 38        |
| 5.1.1.3  | Escala dos planos de deslizamento e das discordâncias<br>individuais . . . . .                           | 38        |
| 5.1.1.4  | Escala atômica . . . . .   | 39        |
| 5.2      | Modelos analíticos de trincas<br>em monocristais . . . . .   | 39        |
| 5.2.1    | Modelo de Rice (1987) para trinca em monocristais sob EPD . . .  | 39        |
| 5.2.1.1  | Condições de contorno do modelo e sistemas efetivos . . .  | 40        |
| 5.2.1.2  | Tensão crítica dos sistemas efetivos . . . . .   | 41        |
| 5.2.1.3  | Superfície de escoamento . . . . .   | 42        |
| 5.2.1.4  | Condições em trincas estacionárias: equilíbrio de tensões<br>e campos de tensões e deformações . . . . . | 43        |
| 5.2.2    | Contribuição de Drugan (2001) ao modelo de Rice (1987) . . . . .   | 46        |
| <b>6</b> | <b>Modelo para Estado Plano de Deformações . . . . .</b>   | <b>49</b> |
| 6.1      | Relação constitutiva cristalina . . . . .  | 49        |
| 6.2      | Solução do problema elastoplástico . . . . .   | 50        |
| 6.3      | Influência da orientação dos sistemas<br>efetivos no cristal de Rice . . . . .                           | 53        |
| 6.3.1    | Relação constitutiva para o conjunto de sistemas efetivos . . . . .                                      | 54        |
| 6.4      | Invertibilidade e condicionamento da<br>matriz constitutiva . . . . .                                    | 55        |
| <b>7</b> | <b>Modelo numérico . . . . .</b>   | <b>59</b> |
| 7.1      | Discretização em elementos finitos . . . . .   | 59        |
| 7.2      | Mono-elementos . . . . .   | 60        |
| 7.2.1    | Rotações $\varphi$ . . . . .   | 64        |
| 7.3      | Aplicação a trinca em monocristal CFC . . . . .  | 67        |
| 7.3.1    | Malha de elementos finitos . . . . .   | 67        |
| 7.4      | Resultados e discussão . . . . .   | 68        |
| <b>8</b> | <b>Conclusão . . . . .</b>   | <b>73</b> |
| 8.1      | Sugestões para trabalhos futuros . . . . .   | 74        |
|          | <b>Referências . . . . .</b>   | <b>75</b> |
|          | <b>Anexos . . . . .</b>  | <b>79</b> |
|          | <b>ANEXO A Transformações de simetria, sistemas cristalinos e redes de<br/>Bravais . . . . .</b>         | <b>80</b> |

|       |  |    |
|-------|--|----|
| A.1   | Transformações de simetria . . . . .                       | 80 |
| A.2   | Redes de Bravais . . . . .                                 | 82 |
| A.2.1 | Sistemas cristalinos e redes de Bravais . . . . .          | 83 |
| A.2.2 | Propriedades macroscópicas e classes cristalinas . . . . . | 86 |

# 1 INTRODUÇÃO

Apesar da teoria clássica da plasticidade ser eficaz na descrição do comportamento mecânico macroscópico de sólidos policristalinos, ela não descreve o que transcorre na microestrutura do material. Na maioria das aplicações em engenharia, fenômenos característicos desta escala são interpretados de forma indireta através da plasticidade macroscópica. Isto dificulta o entendimento de particularidades microestruturais em problemas fortemente dependentes da estrutura cristalina, como efeitos de escala no endurecimento, ductilidade e fratura. Além disso, o avanço das microtecnologias e da produção de novos materiais necessita uma abordagem direcionada ao comportamento no âmbito microscópico.

É de conhecimento geral que o comportamento à fratura de metais é dependente pela evolução dos fenômenos físicos que ocorrem na ponta das trincas, em escalas onde o comportamento do material é fortemente dirigido pelas características microestruturais. Entre os fenômenos importantes estão *a deformação plástica a nível da estrutura cristalina* e *a separação do material na escala atômica*. Os efeitos nas menores escalas porém são induzidos pelo que se manifesta na escala macroscópica através da propagação de efeitos entre as diferentes escalas do material. Assim, os eventos de fratura não podem ser completamente compreendidos senão através de uma abordagem multiescala.

Para o estudo do comportamento elastoplástico à fratura é admissível considerar a ponta da trinca imersa em um monocristal metálico. Dessa forma, o estudo do comportamento de *monocristais* à fratura é de grande relevância ao estudo da *Mecânica da Fratura* em si. Além disso é de importância também às aplicações industriais: lâminas de monocristal, como a apresentada na Figura 1, apesar do custo elevado têm utilização vantajosas em turbinas aeronáuticas devido às propriedades termomecânicas.

No contexto de engenharia, uma das formas mais utilizadas para analisar o comportamento elastoplástico de monocristais tem sido através das teorias de *plasticidade cristalina*. A seguir é apresentado um breve histórico sobre importantes trabalhos envolvendo o tema nas últimas décadas.

## 1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO

Ao longo das últimas décadas a elastoplasticidade de monocristais metálicos tem sido tratada analítica e numericamente. Através da teoria de plasticidade monocristalina de Asaro e Rice (1977) , Peirce, Asaro e Needleman (1982) analisaram numericamente deformações não uniformes e localizadas em monocristais dúcteis; Steinmann e Stein (1996)

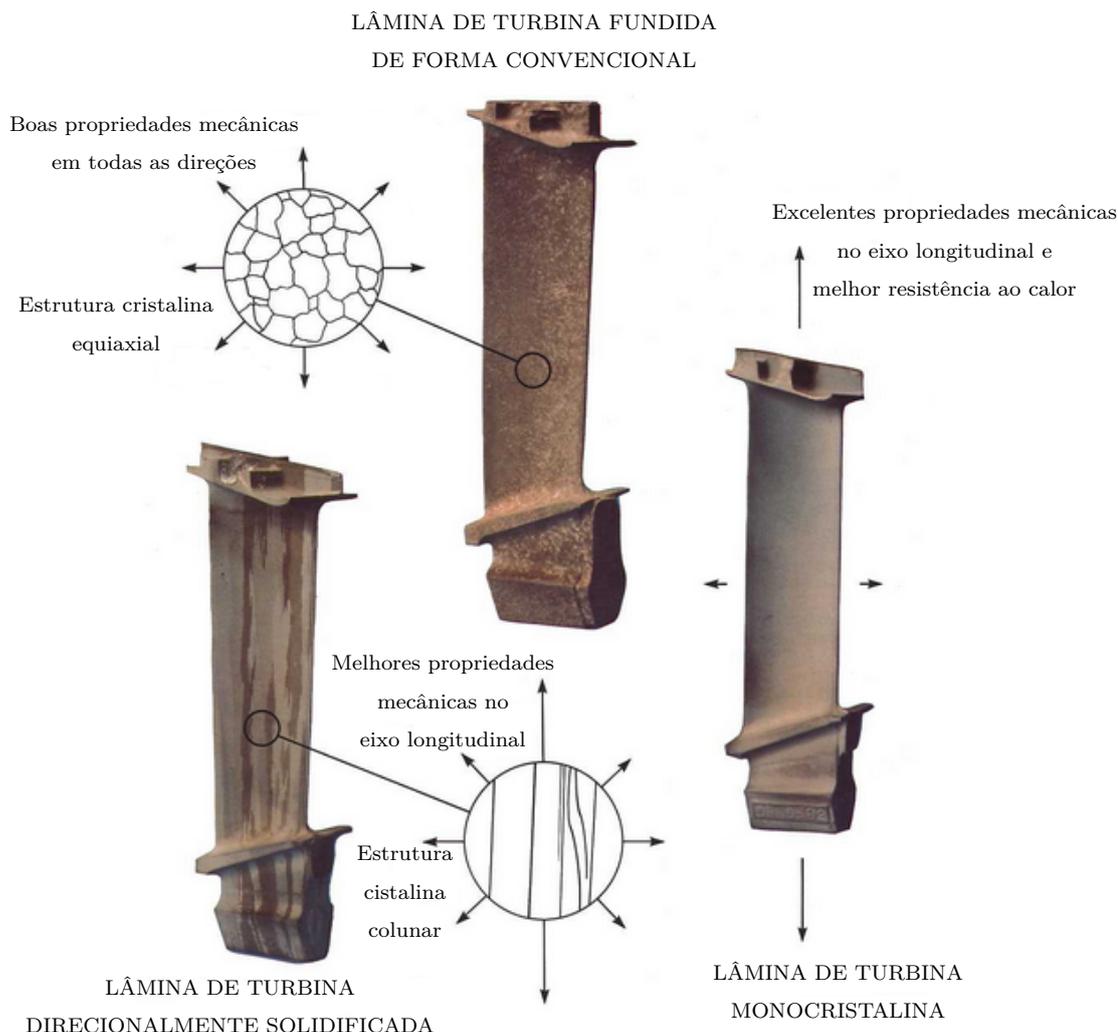


Figura 1 – Lâminas de turbinas aeronáuticas: direcionalmente solidificadas (esquerda), policristalinas convencionais (centro) e monocristalinas (direita). Fonte: Golival (2018).

contribuíram para a análise numérica nos mesmos conceitos. Bittencourt et al. (2003), Bittencourt (2012), Bittencourt (2014) realizaram análises numéricas utilizando a teoria de plasticidade cristalina não-local de Gurtin (2002).

Em mecânica da fratura, Rice (1987), Rice e Saeedvafa (1988) e Drugan (2001) trataram do campo de tensões na ponta de trincas em monocristais através de análise assintótica. Rice, Hawk e Asaro (1990) e Cuitino e Ortiz (1993) trataram numericamente o problema em plasticidade cristalina, enquanto Cleveringa, Giessen e Needleman (2000) e Van der Giessen et al. (2001) utilizaram teoria de discordância discretas, e Columbus e Grujicic (2002) compararam resultados de discordâncias discretas com teoria de plasticidade cristalina não local. Recentemente, Niordson e Kysar (2014) e Juul, Nielsen e Niordson (2017) utilizaram o modelo de cristal Rice (1987) em análises numéricas.

No presente trabalho, os campos de tensões em torno de uma trinca estacionária imersa

em um monocristal metálico de estrutura cúbica de face centrada (CFC) são obtidos numericamente considerando uma relação constitutiva elastoplástica cristalina não viscosa. Neste caso, considera-se o monocristal como perfeitamente plástico. Os campos obtidos são comparados com os resultados de aproximação assintótica a ponta da trinca.

É preciso salientar ainda que a teoria de plasticidade adotada neste trabalho foi utilizada amplamente pela comunidade internacional nas duas últimas décadas do século passado e também nos primeiros anos deste século. Apesar da importância do problema, trabalhos abordando o tema são relativamente escassos no Brasil, uma justificativa para o estudo no âmbito nacional.

## 1.2 OBJETIVOS

Este trabalho é o primeiro no PPGEC contemplando o tema e, de fato, um objetivo secundário é contribuir ao estabelecimento do tema de pesquisa no programa.<sup>1</sup> Dessa forma, é dada uma atenção especial na revisão bibliográfica a alguns tópicos básicos acerca dos temas cristalografia, discordâncias e plasticidade cristalina. Isto foi adotado para dar algum suporte a futuros trabalhos que venham a ser desenvolvidos.

### 1.2.1 Objetivo Principal

O objetivo principal é o desenvolvimento de um código para simulação numérica de monocristais metálicos sujeitos a deformações elásticas e plásticas sob estado plano de deformações e a aplicação à simulação dos campos de tensões e deformações em torno da ponta de uma trinca em um monocristal.

### 1.2.2 Objetivos Específicos

Entre os objetivos específicos é possível citar:

- Implementar modelos de endurecimento;
- Implementar a possibilidade de se considerar diferentes orientações da rede cristalina em relação ao domínio macroscópico;
- Verificar solubilidade do sistema de equações lineares obtido a partir da relação constitutiva;
- Verificar a discrepância dos resultados para a trinca estacionária com os resultados analíticos do problema aproximado e resultados numéricos de outros autores.

<sup>1</sup> Juntamente com os trabalhos de Bittencourt (2012) e Bittencourt (2014).

### 1.3 METODOLOGIA

O estudo aborda a mecânica de monocristais de *estrutura cúbica de face centrada* (CFC). Primeiramente é elaborado o desenvolvimento do modelo e equações em plasticidade cristalina para o caso de cristais sob *estado plano de deformações* (EPD).

Para a discretização numérica dos problemas utiliza-se o *método dos elementos finitos* (MEF), com a implementação em elementos quadriláteros bilineares. Os modelos de material elastoplástico cristalino são incorporados às rotinas padrão do método.

São feitos modelos de mono-elemento sob deformações uniformes para verificação do cumprimento da relação constitutiva, i.e. se o estado de tensões permanece sobre a superfície de plastificação, tanto para o caso elastoplástico perfeito (EPP) quanto para casos com endurecimento.

O modelo numérico é validado através da comparação com resultados analíticos para trica em monocristais.

### 1.4 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO

Os Capítulos 2, 3, 4 e 5 contemplam a revisão bibliográfica e os Capítulos 6 e 7 abordam o desenvolvimento do modelo e resultados. Em síntese:

- Capítulo 2 (Microestrutura dos metais): São abordados conceitos básicos de cristalografia (e física de cristais) tais como *índices de Miller* e *defeitos de rede*;
- Capítulo 3 (Deformação plástica em cristais metálicos): Comenta-se sobre os *primeiros estudos* sobre deformação plástica em monocristais, definição de *sistemas de deslizamento* cristalográficos<sup>2</sup>, *lei de Schmid*, observação do *endurecimento* por deformação, primeiras teorias sobre limite elástico de monocristais e verificação de *desvios* ao comportamento teórico, *discordâncias*, e efeitos do *auto-endurecimento* e *endurecimento latente*;
- Capítulo 4 (Elastoplasticidade em meios cristalinos): A teoria de plasticidade cristalina em grandes deformações utilizada por Asaro (1983). Também, comenta-se sobre a forma do tensor de elasticidade para cristais e algumas leis de endurecimento encontradas na literatura;
- Capítulo 5 (Fratura em cristais metálicos): São abordadas as *escalas materiais* relevantes no processo de fratura e *resultados analíticos* (aproximados) para os

<sup>2</sup> Adotou-se no texto a nomenclatura *sistemas cristalinos* quando referiu-se aos tipos de estruturas cristalinas e *sistemas cristalográficos* quando referiu-se aos sistemas de deslizamento do cristal.

campos de tensões e deformações na ponta de trincas sob EPD em monocristais metálicos;

- Capítulo 6 (Modelo para estado plano de deformações): É desenvolvido o modelo com base na teoria apresentada no Capítulo 4 particularizando para o caso de pequenas deformações e verificação da invertibilidade e do condicionamento da equação constitutiva;
- Capítulo 7 (Modelo numérico): Comenta-se sobre aspectos da implementação numérica e apresenta-se os resultados de exemplos sob deformação uniforme e uma simulação dos campos de tensões em uma trinca.
- ANEXO (Transformações de simetria, sistemas cristalinos e redes de Bravais): São abordados conceitos básicos de cristalografia (e física de cristais) tais como *simetria*, *redes de Bravais* e *classes cristalinas*;

Devido à organização do texto, ao leitor é esperado que siga a ordem definida pelos capítulos.

## 1.5 NOTAÇÃO MATEMÁTICA

As notações intrínseca em negrito (e.g.  $\mathbf{F}$ ) e indicial ( $F_{ij}$ )<sup>3</sup> foram adotadas para os tensores (e vetores). Escalares são denotados pela notação convencional, portanto  $F$  e  $\mathbf{F}$  não representam o mesmo objeto. Na álgebra tensorial, os símbolos  $\cdot$  e  $:$  foram adotados respectivamente para as operações de contração simples e dupla contração tensorial e o símbolo  $\otimes$  para o produto tensorial. Procurou-se denotar os índices das componentes tensoriais por letras latinas para o espaço euclidiano tridimensional e por letras gregas para o espaço bidimensional e, nestes casos, a notação somatória de Einstein. Índices relacionados com os sistemas cristalinos são sobrescritos entre parênteses, e, neste caso, utilizou-se o símbolo de soma usual. Para as matrizes reservou-se a notação de linha dupla, ou quadro negro (e.g.  $\mathbb{M}$ ).

<sup>3</sup> A notação indicial segue a usual para o espaço euclidiano e coordenadas cartesianas (índices subscritos). Implementação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal

## 2 MICROESTRUTURA DOS METAIS

### 2.1 NATUREZA CRISTALINA DA MATÉRIA

Durante o desenvolvimento da ciência natural, o estudo da natureza cristalina dos sólidos deu-se adjacente à evolução da teoria molecular da matéria. Uma breve história da cristalografia e mineralogia foi publicada por Kubbinga (2012). Em síntese, um cristal é fisicamente um arranjo periódico de átomos (ou moléculas) formado em ambiente estável a partir de uma solução. Uma discussão acerca dos temas *transformações de simetria*, *classes cristalinas* e *redes de Bravais* é feita no Apêndice A.

São chamados de *sistemas cristalinos* os tipos de simetrias que um cristal pode ter *sob rotações e reflexões*. Neste trabalho é dada atenção especial ao sistema cúbico, o qual apresenta o maior grau de simetria. O sistema cúbico compreende três tipos de rede: cúbica *simples* (CS), de *corpo centrado* (CCC) e de *face centrada* (CFC); as três redes cúbicas são apresentadas na Figura 2.

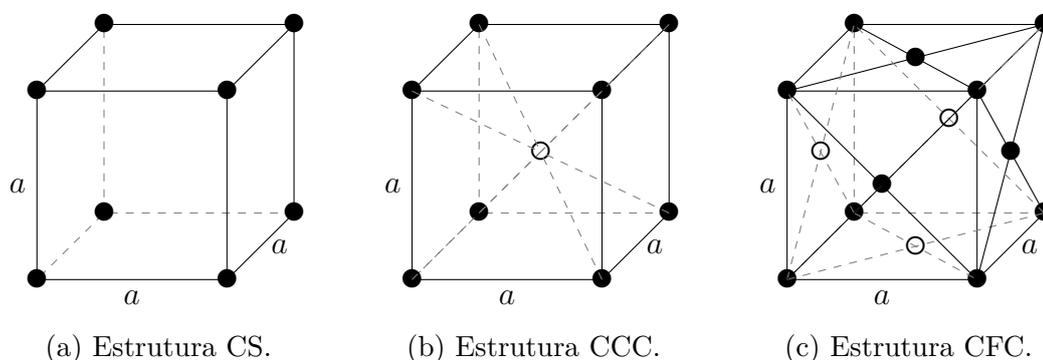


Figura 2 – As três redes cúbicas. As células que aparecem na Figura são as convencionais. Fonte: elaborado pelo autor.

#### 2.1.1 Propriedades macroscópicas

Em muitos fenômenos físicos o comportamento de cristais não depende explicitamente do arranjo dos átomos na rede mas da direção considerada no cristal, de maneira que pode ser considerado homogêneo e contínuo e sua estrutura interna desprezada; tais fenômenos são chamados de macroscópicos. A dependência da direção em propriedades macroscópicas de um corpo cristalino é chamada *anisotropia cristalina*. Por outro lado, as simetrias cristalinas fazem com que as propriedades macroscópicas sejam exatamente iguais em algumas direções, ditas equivalentes.

### 2.1.2 Índices de Miller

No estudo de cristais frequentemente é necessário considerar vários planos e direções passando através da rede, pelos pontos da rede. A seguir é discutido o método para representar estes planos e direções em um cristal; tais objetos geométricos (no cristal) receberão a nomenclatura “cristalográfico” para evitar confusão com o conteúdo já mencionado no texto e para remeter à cristalografia.

A orientação de um plano cristalográfico ou uma direção cristalográfica pode ser descrita através de uma tripla de índices, chamados *índices de Miller*. Dados os índices de Miller de um plano,  $u$ ,  $v$  e  $w$ , a orientação do plano é representada por  $(uvw)$ . Para uma direção cristalográfica utiliza-se a notação  $[uvw]$ .

Sejam  $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$  e  $\mathbf{e}_3$  três vetores ortonormais<sup>1</sup> que definem um espaço tridimensional, uma família de planos neste espaço é representado pela equação

$$l x_1 + m x_2 + n x_3 = k ,$$

com  $l$ ,  $m$ ,  $n$  e  $k$  inteiros, cada  $k$  representando um plano da família. Logo  $x_1 = k/l$ ,  $x_2 = k/m$  e  $x_3 = k/n$  são os pontos de interseção do plano com os três eixos.

Porém a posição absoluta de um plano em um cristal não é importante, apenas sua direção; então é suficiente tomar  $k = 1$ . Logo, os pontos de interseção de um plano cristalográfico com os três eixos são  $x_1 = 1/l$ ,  $x_2 = 1/m$  e  $x_3 = 1/n$ . A obtenção dos índices de Miller de um plano para um *cristal cúbico* envolve os seguintes passos:

1. Determinar as coordenadas dos pontos de intersecção  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  entre o plano e os eixos coordenados ortonormais  $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$  e  $\mathbf{e}_3$ .
2. Tomar o inverso das coordenadas determinadas, ou seja  $l = 1/x_1$ ,  $m = 1/x_2$  e  $n = 1/x_3$ .
3. Determinar o conjunto dos três menores números inteiros  $u$ ,  $v$  e  $w$  tais que as proporções  $u:v:w$  e  $l:m:n$  sejam iguais.

Planos que têm a mesma distribuição atômica são denominados cristalograficamente equivalentes.

Os índices de Miller de direções são meramente as coordenadas vetoriais (inteiras) da direção em relação aos eixos cristalinos. Direções cristalográficas com mesma distribuição atômica são denominadas direções cristalograficamente equivalentes.

<sup>1</sup> Na definição geral os vetores são tomados como os eixos das células cristalinas. Como neste trabalho somente serão abordadas células cúbicas é conveniente simplificar a definição.

Um conjunto de planos cristalograficamente equivalentes é chamado uma família de planos cristalográficos; um conjunto de direções cristalograficamente equivalentes é chamado de família de direções. Para designar uma família de planos com índices de Miller utiliza-se a notação  $\{uvw\}$  e para designar uma família de direções utiliza-se  $\langle uvw \rangle$ .

### 2.1.3 Ligações químicas e estruturas cristalinas de metais

Metais têm menos elétrons nas camadas eletrônicas incompletas do que o necessário para haver ligações covalentes saturadas entre átomos adjacentes no estado sólido. Em ligações insaturadas os elétrons não se encontram bem localizados relativamente aos átomos interagentes e é possível assumir que os átomos “perdem” estes elétrons mais externos, ditos *livres*. Enquanto os íons positivos são regularmente espaçados os elétrons livres preenchem o espaço mais ou menos uniformemente. As ligações nas quais existe esta nuvem móvel de elétrons são chamadas *ligações metálicas*. Em metais de transição (e.g. Ferro) que têm camadas eletrônicas internas incompletas elétrons internos também participam da ligação.

É possível dividir os tipos de ligações químicas em ligações *direcionais* e *não-direcionais*. Na realidade as únicas ligações direcionais são as ligações covalentes devido a alta densidade eletrônica ao longo das linhas que unem os átomos dois a dois. Isto tem forte influência nos tipos de estruturas em que sólidos covalentes cristalizam. Por outro lado, ligações de van der Waals, iônicas e metálicas são não direcionais. Cristais moleculares iônicos e metais tendem a cristalizar-se de forma que haja o maior empacotamento de partículas possível. Então, metais puros (formados por átomos de mesmo “volume”) tendem a cristalizar-se com estruturas compactas como HC (hexagonal compacta), CFC e CCC, redes com maior empacotamento para partículas idênticas (SÓLYOM, 2007, p. 235).

## 2.2 DEFEITOS DE REDE

A estrutura de cristais reais desvia-se das redes com periodicidade perfeita pela existência de defeitos. Modelos de rede perfeita são utilizados para explicar propriedades *insensíveis à estrutura*<sup>2</sup> dos metais, enquanto para entender propriedades *sensíveis à estrutura* é necessário a consideração de diversos tipos de *defeitos de rede*, que são desvios à periodicidade de um arranjo atômico. A Figura 3 apresenta a classificação de algumas propriedades físicas de cristais nestes dois grupos. Vê-se que praticamente todas as propriedades mecânicas de cristais, com exceção das propriedades elásticas, são sensíveis à estrutura (DIETER, 1976, p. 85-86).

Os defeitos de rede são classificados geralmente em quatro grupos: *defeitos pontuais*, *defeitos*

<sup>2</sup> Tais propriedades são mensuráveis globalmente, i. e., dada “uma certa média”.

| <b>Insensíveis à estrutura</b>   | <b>Sensíveis à estrutura</b> |
|----------------------------------|------------------------------|
| Constantes elásticas             | Condutividade elétrica       |
| Ponto de fusão                   | Propriedades semicondutoras  |
| Densidade                        | Tensão de escoamento         |
| Calor específico                 | Resistência à fratura        |
| Coefficiente de expansão térmica | Limite de fluência           |

Figura 3 – Quadro relativo à classificação de algumas propriedades físicas de cristais em *insensíveis à estrutura* e *sensíveis à estrutura*. Fonte: Dieter (1976, p. 86).

*lineares, defeitos superficiais e defeitos volumétricos*. Defeitos pontuais (ou imperfeições pontuais) são desvios ao arranjo periódico localizados na vizinhança de alguns poucos átomos; defeitos lineares são imperfeições que se estendem a pequenas distâncias ao longo de duas direções enquanto em uma terceira direção pode estender-se indefinidamente; defeitos superficiais estendem-se indefinidamente em um plano ou superfície curva e são limitados a poucas distâncias de rede em uma terceira direção; em defeitos volumétricos a estrutura em uma região macroscópica tridimensional é diferente do resto do corpo (SÓLYOM, 2007, p. 274).

Será importante neste trabalho um tipo de defeito linear denominado *discordância*. Tais defeitos são fundamentais na explicação de alguns fenômenos e propriedades de cristais metálicos como sua cristalização, deformação plástica e interface entre grãos em policristais<sup>3</sup>.

<sup>3</sup> Sabe-se que a interface entre os grãos em policristais são defeitos superficiais gerados por acúmulo de discordâncias e pelas mudanças de orientação da rede.

### 3 DEFORMAÇÃO PLÁSTICA EM CRISTAIS METÁLICOS

#### 3.1 PRIMEIROS ESTUDOS

Importantes estudos em cristalografia de policristais metálicos deformados além do limite elástico foram apresentados por Ewing e Rosenhain (1899, 1900), cujos resultados marcaram o início das pesquisas em plasticidade cristalina. Estes cientistas observaram na superfície dos espécimes deformados plasticamente *degraus de deslizamento* causados pelo surgimento de *bandas de deslizamento* internas, nas quais uma porção do material era cisalhada em relação à outra. A Figura 4 apresenta um diagrama esquemático da configuração da superfície de um policristal metálico antes e após a deformação plástica.

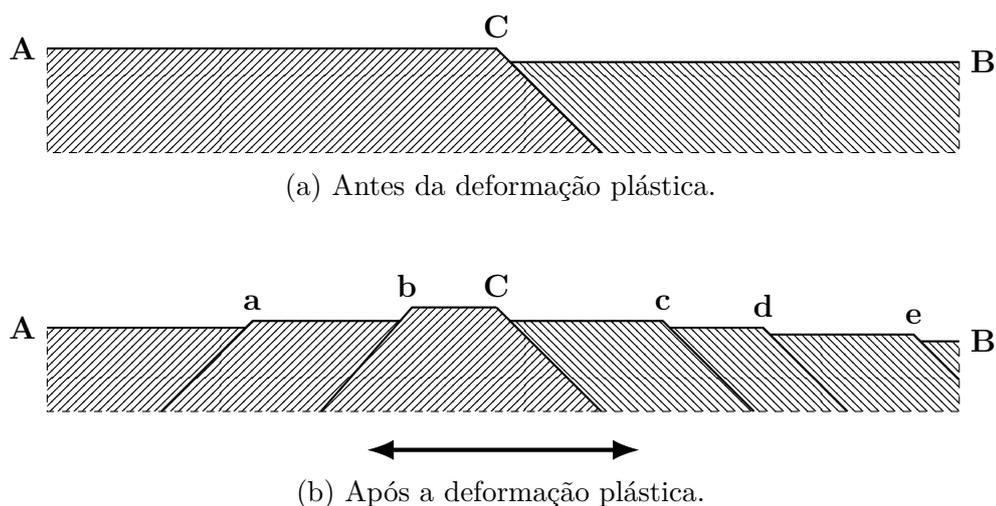


Figura 4 – Diagrama de um corte na superfície de um policristal (a) antes e (b) após a deformação plástica. O tracejado indica as orientações cristalográficas e a seta dupla indica a direção de sollicitação. Fonte: Ewing e Rosenhain (1900, p. 362).

A região identificada como **C** indica a interface entre dois grãos **AC** e **CB** com orientações cristalográficas mais ou menos homogêneas. Após a deformação plástica surgem bandas de deslizamento nos sistemas cristalográficos de cada grão, emergindo à superfície e formando degraus de deslizamento. Estes degraus ficam evidentes em micrografias ópticas devido a variação da reflexão luminosa, como pode ser observado na micrografia óptica da Figura 5.

As conclusões dos trabalhos de Ewing e Rosenhain podem ser resumidas em:

- Metais e ligas metálicas são cristalinos ou compostos de agregados monocristalinos;



Figura 5 – Micrografia óptica de um policristal de chumbo após a deformação. Fonte: Ewing e Rosenhain (1900, p. 362).

- A deformação plástica ocorre por cisalhamento em determinadas famílias de planos cristalográficos e em direções cristalográficas bem definidas;
- A estrutura cristalina do metal é preservada durante a deformação plástica, o que indica que o deslizamento acontece em múltiplos inteiros dos espaçamentos da rede cristalina.

Na década de 1920, técnicas de raios-X começaram a ser usadas nos estudos de deformação plástica de monocristais, proporcionando avanços em análises quantitativas e microestruturais da deformação. Destacam-se os trabalhos de Taylor e Elam (1923, 1925) na análise de monocristais de alumínio (estrutura CFC) deformados sob tração. Os autores (1925, p. 28) observaram que para os monocristais de alumínio: “Dos doze modos possíveis de cisalhamento cristalograficamente similares, o modo no qual a componente da tensão de cisalhamento na direção do cisalhamento é a mais elevada é o que realmente ocorreu” (tradução nossa).

Schmid (1924, apud ASARO, 1983, p. 8) utilizando dados de monocristais de zinco (estrutura HC) sob tração, propôs que o fluxo plástico começaria em um sistema cristalográfico quando a tensão de cisalhamento projetada atingisse um valor crítico que independe da orientação do eixo de tração e, então, de outras componentes da tensão projetadas na

---

Implementação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal

rede. Esta observação do comportamento cristalino é conhecida como *lei de Schmid* e é semelhante ao comportamento descrito por Taylor e Elam (1925). É importante destacar que as observações nas quais está baseada a lei de Schmid são muito particulares das condições de contorno (tração simples) e tipo de cristais (CFC e HC) empregados nos estudos.

Para os diferentes tipos de estrutura cristalina, os planos em que deformações plásticas ocorrem são denominados *planos de deslizamento*, e as direções, *direções de deslizamento*. O conjunto formado por um plano de deslizamento e uma das direções associadas a este é chamado um *sistema de deslizamento*. Os sistemas de deslizamento de cristais metálicos começaram a ser identificados juntamente com as pesquisas de deformação envolvendo difração de raios-X.

As observações experimentais indicam que na maioria dos metais os planos de deslizamento são os planos de *máxima densidade planar* de átomos (que conseqüentemente tem máxima separação) e as direções de deslizamento são as direções de *máxima densidade linear* para uma determinada estrutura cristalina. Em metais CFC o deslizamento ocorre na família de planos  $\{111\}$  e família de direções  $\langle 110 \rangle$  (identificados na Figura 6) enquanto em metais CCC o deslizamento ocorre em  $\langle 111 \rangle$  mas nas família de planos  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  e  $\{123\}$  (KHAN; HUANG, 1995, p. 319).

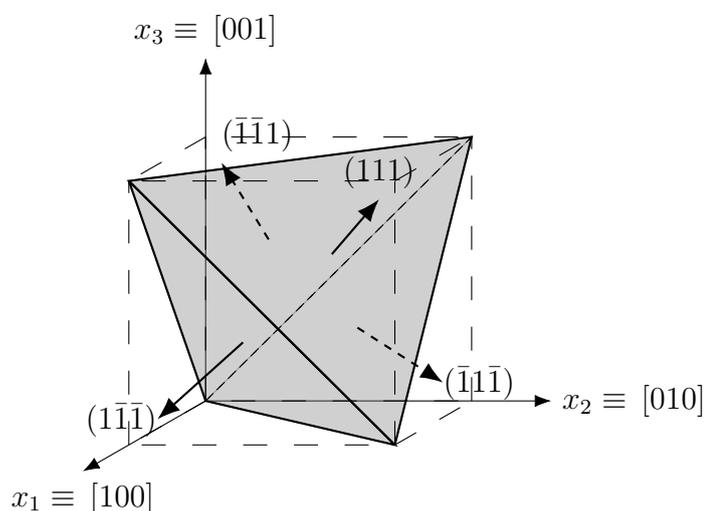


Figura 6 – Sistemas de deslizamento em um cristal CFC. O triedro  $\{x_1, x_2, x_3\}$  define o sistema de coordenadas vinculado ao cristal utilizado para numeração dos direções cristalográficas em termos dos índices de Miller. Os planos de deslizamento são os planos diagonais gerados pelos triângulos em cinza, identificados por seus vetores diretores. As direções de deslizamento correspondem às direções definidas pelas arestas dos triângulos. Fonte: elaborado pelo autor.

Apesar destas observações experimentais, desvios à lei de Schmid ocorrem em muitos cristais devido à condições de contorno e principalmente microestruturais, e diversos

estudos existem neste sentido. No entanto, tais desvios e estudos sobre o comportamento nesses casos ficam fora do escopo deste trabalho.

### 3.2 OBSERVAÇÕES SOBRE O ENDURECIMENTO POR DEFORMAÇÃO

Baseando-se em experiências feitas principalmente com monocristais alumínicos Taylor e Elam (1923, 1925) observaram que o material possuía dois tipos bem característicos de endurecimento:

- *Auto-endurecimento*: Endurecimento no próprio sistema cristalográfico que sofre o deslizamento;
- *Endurecimento latente*: Endurecimento de um sistema, mesmo não ativo, causado por um deslizamento em outro sistema.

A Figura 7 apresenta um diagrama esquemático de um monocristal orientado para máxima tensão projetada no sistema  $(\bar{1}11)[110]$ , onde  $\mathbf{m}$  e  $\mathbf{s}$  são vetores unitários nas direções  $[\bar{1}11]$  (normal ao plano de deslizamento) e  $[110]$  (contido no plano de deslizamento) representando respectivamente o plano de deslizamento e a direção de deslizamento do sistema. Então a dupla  $\{\mathbf{m}, \mathbf{s}\}$  define o sistema de deslizamento chamado *sistema primário*.

As considerações a seguir são desenvolvidas por Asaro (1983, p. 10-11). O cristal é considerado rígido-plástico visto que as observações feitas por Taylor e Elam não são afetadas significativamente pela elasticidade. Com o processo de deformação, a rede cristalina rotaciona em relação ao eixo de tensão. A rotação do eixo de carregamento relativa à rede cristalina é indicada no setor de projeção estereográfica da Figura 7e em função da deformação. O vetor de deslizamento  $\mathbf{s}$  rotaciona na direção do vetor diretor do eixo de tração  $\mathbf{T}$  em torno do eixo  $\mathbf{r}$ ,

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{s} \times \mathbf{T}}{\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{T})^2}},$$

$\mathbf{T}$  e  $\mathbf{r}$  são vetores unitários. Tal rotação aumenta a tensão projetada no sistema  $(11\bar{1})[011]$  chamado de *sistema conjugado* ao sistema primário ou *sistema secundário*. É fácil ver que a taxa de rotação  $\dot{\beta}$  em torno de  $\mathbf{r}$  é

$$\dot{\beta} = \dot{\gamma}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{T})\sqrt{1 - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{T})^2},$$

em que  $\dot{\gamma}$  é a taxa de deslizamento no sistema primário.

O tensor de tensões para tração simples têm a forma  $\sigma = \sigma \mathbf{T} \otimes \mathbf{T}$ ; a tensão projetada em um sistema  $\{\mathbf{m}, \mathbf{s}\}$  é  $\tau = \sigma : (\mathbf{m} \otimes \mathbf{s})$ , então

$$\tau = \sigma(\mathbf{m} \cdot \mathbf{T})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{T}) = S\sigma, \tag{3.1}$$

$S = (\mathbf{m} \cdot \mathbf{T})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{T})$  é o *fator de Schmid*. Ou seja, dois sistemas de deslizamento que têm o mesmo fator de Schmid têm tensões projetadas iguais.

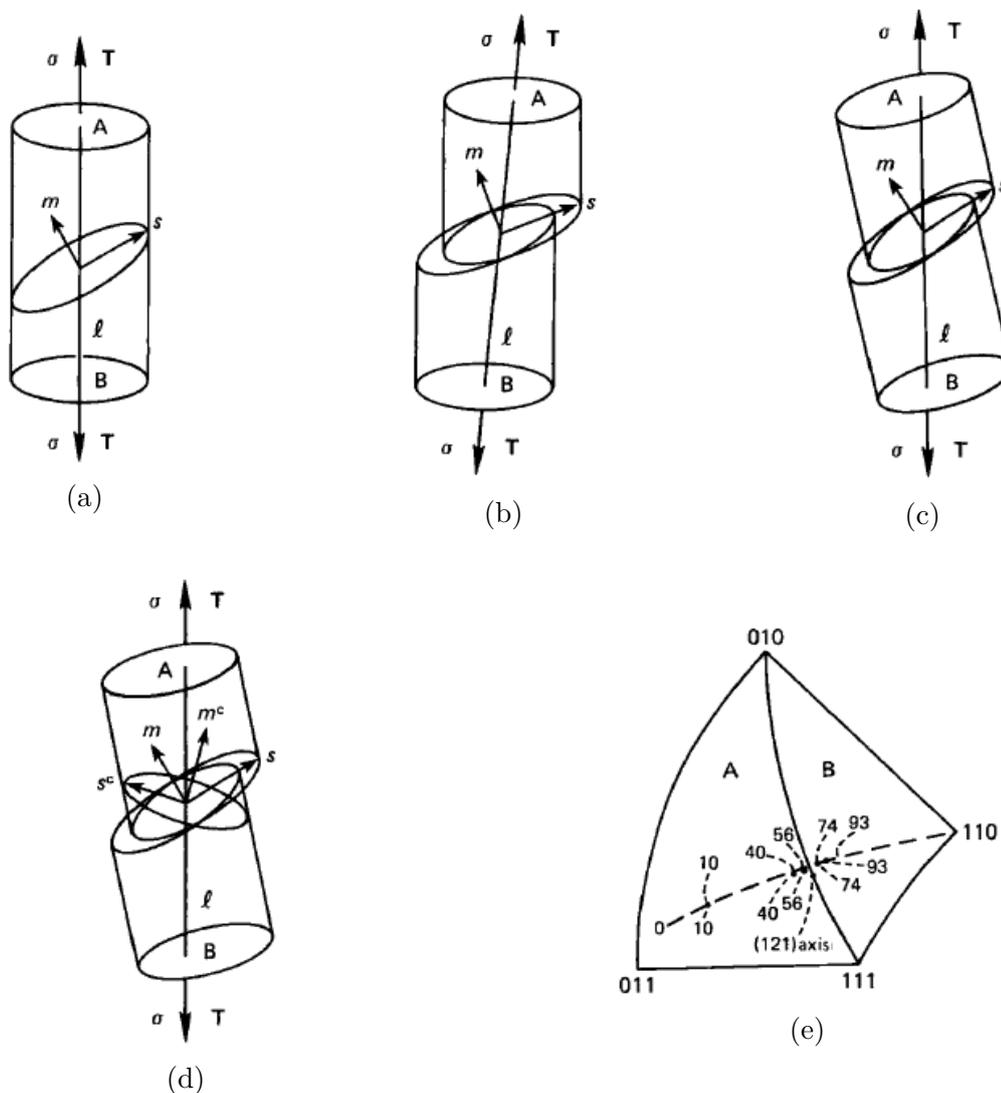


Figura 7 – Diagrama esquemático de um monocristal de alumínio orientado para máxima tensão projetada no sistema  $(\bar{1}11)[110]$ , conforme as experiências de Taylor e Elam (1923, 1925). (a) Espécime indeformado. (b), (c) Rotação relativa entre o eixo de tração e o sistema primário. (d) Deslizamento duplo nos sistemas primário e conjugado. (e) Setor de projeção estereográfica de Taylor e Elam (1923) evidenciando a rotação do eixo de tração relativamente a rede cristalina; marcados os pontos de diversos níveis de deformação. Fonte: Asaro (1983, p. 9).

Se o endurecimento latente do sistema conjugado por deformação no sistema primário for igual ao auto-endurecimento do sistema primário, *deslizamento duplo*<sup>1</sup> irá ocorrer quando a tensão projetada (ou o fator de Schmid) for igual para os dois sistemas. Isto ocorre no limite entre as regiões *A* e *B* da projeção estereográfica da Figura 7e, onde há simetria dos dois sistemas em relação ao eixo **T**. Além disso, a posição do eixo de tração na projeção estereográfica permanecerá na linha de simetria entre as regiões de cada sistema; neste caso diz-se que o deslizamento duplo é simétrico.

Apesar de em alguns testes apresentar-se o deslizamento simétrico, as observações mais marcantes no trabalho de Taylor e Elam (1925) referem-se ao deslizamento assimétrico. As medições de raio-X indicaram que em muitos casos a projeção do eixo de tração ultrapassou a interface de simetria aumentando a tensão projetada no sistema conjugado. Além disso as rotações eram muito menores do que o esperado no caso de deslizamento simples, indicando que o deslizamento duplo ocorre mas a uma taxa menor no sistema conjugado do que no sistema primário, “freando” a rotação do eixo. Esse fenômeno foi denominado *ultrapassagem*<sup>2</sup>. As observações da ultrapassagem indicaram que:

1. Um sistema de deslizamento é endurecido por deformações em outros sistemas mesmo que não esteja ativo;
2. O endurecimento latente é pelo menos da magnitude ou maior do que o auto-endurecimento.

Durante a rotação do sistema cristalino nota-se que, se  $\gamma$  for o deslizamento no sistema primário,

$$\dot{\mathbf{s}} = \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \mathbf{s} \text{ e } \dot{\mathbf{m}} = \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \mathbf{m} ,$$

onde

$$\boldsymbol{\Omega}^* = -\dot{\gamma}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{T})(\mathbf{s} \otimes \mathbf{T} - \mathbf{T} \otimes \mathbf{s})$$

é o tensor velocidade de rotação rígida<sup>3</sup> da rede. Se o sistema primário endurece de acordo com a lei de Schmid na forma  $\dot{\tau}_c = h\dot{\gamma}$ , em que  $\tau_c$  é a tensão crítica e  $h$  a taxa de auto-endurecimento do sistema ativo; e diferenciando a Equação 3.1 em relação ao tempo,

$$\dot{\sigma} = \left( \frac{h}{\cos^2\phi \cos^2\theta} + \frac{\sigma \cos 2\phi}{\cos^2\phi} \right) \dot{\epsilon} , \quad (3.2)$$

onde  $\dot{\epsilon} = \frac{\dot{\gamma}}{\cos\phi \cos\theta}$  é taxa de deformação na direção de tração,  $\cos\theta = \mathbf{m} \cdot \mathbf{T}$  e  $\cos\phi = \mathbf{s} \cdot \mathbf{T}$ .

<sup>1</sup> Isto é, em ambos sistemas primário e secundário.

<sup>2</sup> Traduzido do inglês *overshooting*.

<sup>3</sup> A definição “formal” deste tensor é dada no Capítulo 4.

O primeiro termo do módulo instantâneo da Equação 3.2 refere-se ao aumento da tensão de Cauchy por alongamento da peça enquanto o segundo termo é relacionado à variação de  $\tau$  devido à rotação da rede fixada a tensão  $\sigma$ . Se  $\cos 2\phi < 0$  e  $\frac{h}{\sigma} < |\cos 2\phi| \cos^2\theta$  o módulo instantâneo é negativo e o material amolece. Este amolecimento devido a efeitos puramente geométricos é chamado de *amolecimento geométrico* e se ocorrer localizadamente na seção do cristal pode promover deformação não uniforme e localizada<sup>4</sup>.

### 3.3 LIMITE ELÁSTICO DE UM CRISTAL METÁLICO PERFEITO

Frenkel (1926) estimou a tensão de cisalhamento necessária para o movimento de um plano de átomos sobre outro em um cristal perfeito. Assume-se dois planos de átomos espaçadas de  $d$ , e espaçamento interatômico entre os átomos de cada plano  $\lambda$ . O deslizamento entre as dois planos é denotado por  $x$ . Considera-se que as duas fileiras movimentem-se rigidamente e a tensão de cisalhamento atuante no sistema é denominada  $S$ . O modelo é apresentado na Figura 8.

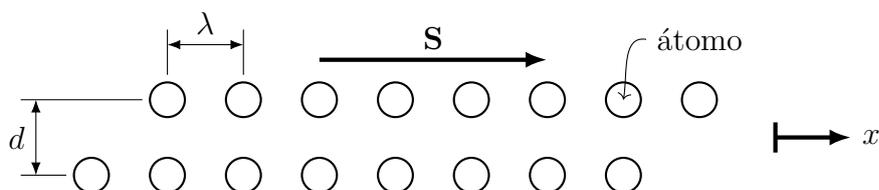


Figura 8 – Dois planos de átomos sob cisalhamento. Fonte: Khan e Huang (1995, p. 318).

Nas posições (de equilíbrio) identificadas com  $x=0$  e  $x=\lambda$ , a tensão de cisalhamento  $S$  necessária para manter o equilíbrio é nula. O mesmo ocorre para  $x=\lambda/2$  por conta da simetria da configuração. Entre estas posições cada átomo é atraído em direção ao átomo mais próximo contido no plano adjacente, de maneira que a tensão de cisalhamento é uma função periódica do deslizamento. Com base nisso, Frenkel propôs uma variação senoidal para a tensão, expressa por

$$S = S_m \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right),$$

onde  $S_m$  é a amplitude e  $2\pi/\lambda$  o período. Para pequenos deslocamentos a lei de Hooke pode ser aplicada,  $S = Gs = Gx/d$ , onde  $s$  é a deformação de cisalhamento e  $G$  é o módulo de cisalhamento do material, e vale  $S \approx S_m 2\pi x/\lambda$ . Então, nessas condições, a tensão de cisalhamento máxima para o movimento da rede é

$$S_m = \frac{G}{2\pi} \frac{\lambda}{d}. \quad (3.3)$$

<sup>4</sup> Isto explica a fenomenologia da deformação de monocristais em grandes deformações onde surgem bandas de deslizamento evidenciando cisalhamento altamente localizado.

Nota-se que  $S_m$  é mínima quando o espaçamento entre os planos é máximo e o espaçamento interatômico é mínimo. Isto concorda com os experimentos de definição de sistemas de deslizamento mencionados anteriormente.

Para muitos cristais  $\lambda$  e  $d$  são aproximadamente iguais. Em cristais CFC por exemplo,  $\lambda/d = \sqrt{3}/\sqrt{2}$ . Neste caso a Equação 3.3 mostra que a resistência ao cisalhamento teórica é aproximadamente  $S_m \approx G/5$ . À época do trabalho de Frenkel, os ensaios de deformação plástica em monocristais indicavam resistências da ordem de  $10^{-6} G \sim 10^{-4} G$ , muito menores que a teórica. Cálculos considerando leis de forças interatômicas mais realistas resultaram em resistências teóricas próximas de  $G/30$ , porém ainda muito acima do valor real (KHAN; HUANG, 1995, p. 320). A disparidade entre os resultados teóricos e reais levaram ao postulado da existência de defeitos na estrutura cristalina que reduzem a resistência do cristal.

### 3.4 DISCORDÂNCIAS

As discordâncias foram postuladas independentemente por Taylor (1934), Polanyi (1934) e Orowan (1934) para explicar a baixa resistência dos cristais metálicos reais em relação à estimativa teórica.

Taylor (1934), baseando-se em hipóteses (à sua época) sobre o endurecimento de monocristais e observações fotoelásticas da deformação plástica<sup>5</sup>, reconheceu que o deslizamento de fato deveria ocorrer em uma pequena região desordenada do cristal, a qual denominou *discordância*, que se propagaria através de um plano cristalográfico deixando o cristal bem ordenado em seu “rastro”. Adotando um modelo atômico para o cristal ele conseguiu explicar de que forma uma discordância altera sua resistência.

Em um cristal perfeito uma linha de átomos em equilíbrio ocupa uma posição de mínima energia potencial segundo um *potencial interatômico*, conforme a Figura 9. Somente é possível deslocar uma linha de átomos na rede fornecendo a esta uma energia equivalente à “barreira de potencial”. Na Figura 9 assume-se que a fileira de átomos **C–D** está sujeita à um potencial devido à interação com as fileiras **A** e **B** da forma

$$\phi = -2A \cos \frac{2\pi x}{\lambda}, \quad (3.4)$$

$\lambda$  o espaçamento interatômico,  $x$  a distância a partir de  $\mathbf{C}_0$ , de forma que a barreira de potencial a vencer é  $4A$ ,  $A$  uma constante.

Taylor (1934) demonstrou que a existência de uma linha de átomos vazia na fileira **C–D** modifica o potencial interatômico reduzindo a barreira de potencial próximo a ela. Na

<sup>5</sup> Descritas por Joffe e Loeb (1928, p. 46-47).

Figura 10 é apresentada uma representação da distribuição de átomos em torno de uma discordância. Átomos logo acima do centro da discordância são comprimidos e logo abaixo são tracionados de maneira que a existência de uma discordância impõe campos de tensões e deformações não nulos no cristal. Se em um comprimento  $L$  a fileira **B** possui  $N$  átomos então neste mesmo comprimento a fileira **A** possui  $N + 1$  átomos.

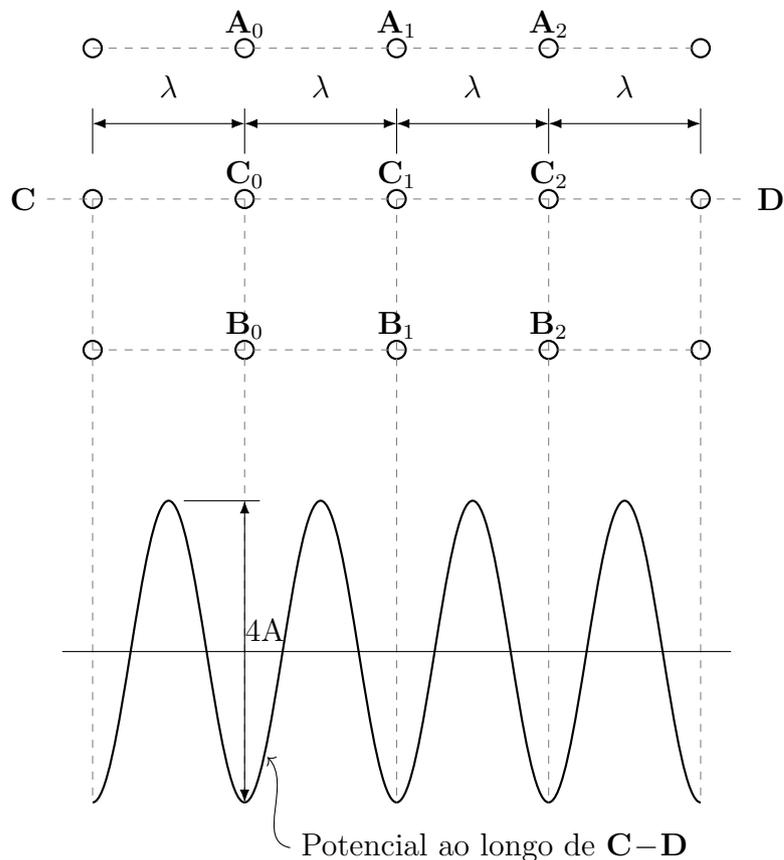


Figura 9 – Potencial interatômico em um cristal perfeito. Fonte: Taylor (1934, p. 371).

A configuração da rede neste caso deve ser obtida através do equilíbrio das interações atômicas, porém pode ser inferida ao considerar-se  $N + 2$  átomos na fileira inferior, portanto  $N + 1$  átomos na fileira superior e um espaçamento de  $(N + 1)\lambda/2$  entre os átomos da fileira **C–D**. Seguindo a Equação 3.4 o potencial interatômico fica

$$\phi = -A \cos 2\pi \frac{x}{\lambda} \left( \frac{N + 1}{N + 2} \right) - A \cos 2\pi \frac{x}{\lambda} \left( \frac{N}{N + 2} \right), \quad (3.5)$$

Na Figura 10 é exibido o gráfico da função  $\phi(x)$  definida na Equação 3.5. Então, a existência de um defeito deste tipo reduz a barreira de potencial necessária para o deslocamento de uma linha de átomos em **C<sub>1</sub>** ou **C<sub>2</sub>** para **O**. Este tipo de defeito é chamado de *discordância em aresta* ou *discordância em cunha* (ou ainda *discordância de Taylor-Orowan*). Se houver energia térmica suficiente para, por exemplo, átomos em **C<sub>2</sub>** deslocarem-se para **O** a discordância se desloca.

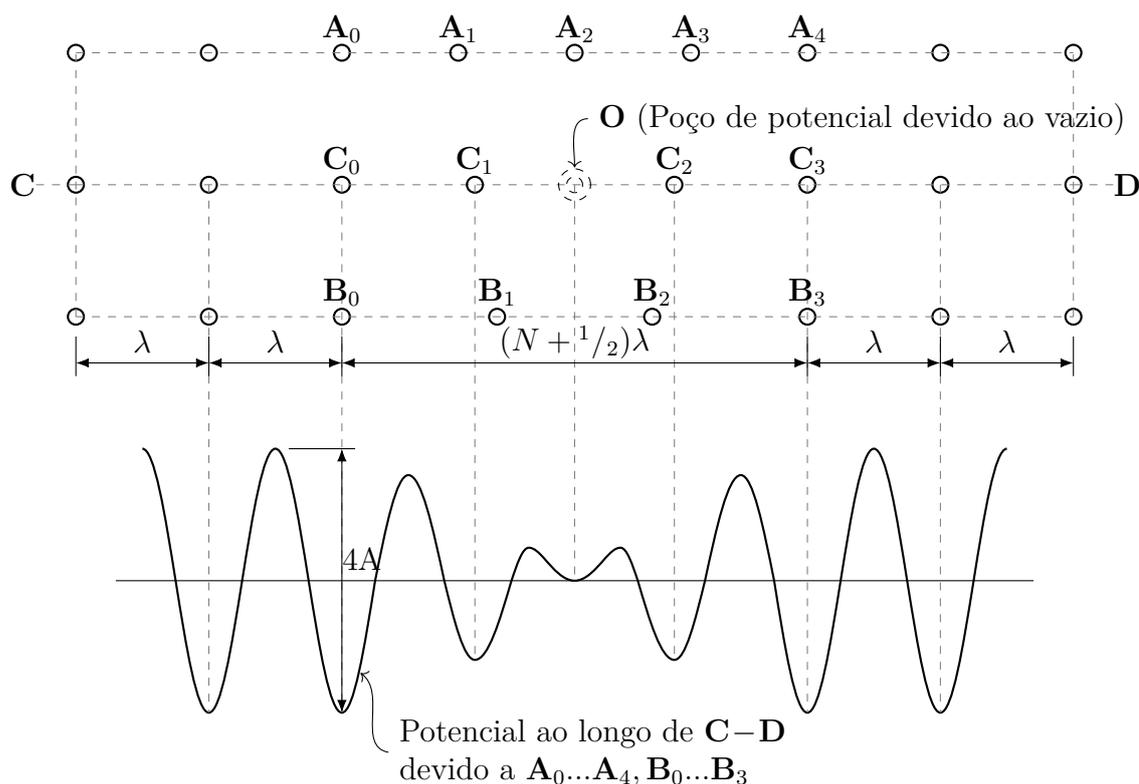


Figura 10 – Potencial interatômico próximo a uma discordância. Fonte: Taylor (1934, p. 371).

Discute-se agora o que ocorre quando aplicado a esse sistema uma tensão de cisalhamento externa. A aplicação de uma tensão externa gera um pequeno deslocamento na rede, ocasionando variação no potencial interatômico resultante em **C–D**. Se  $\delta$  for o deslocamento, então o potencial fica

$$\phi = -A \cos 2\pi \frac{x - \delta}{\lambda} \left( \frac{N + 1}{N + 2} \right) - A \cos 2\pi \frac{x}{\lambda} \left( \frac{N}{N + 2} \right) . \quad (3.6)$$

Da Equação 3.6, um gráfico da função  $\phi(x)$  é apresentado na Figura 11. A aplicação da tensão reduz drasticamente a barreira de potencial de maneira que somente a energia térmica de vibração do cristal já pode ocasionar deslocamentos atômicos na rede. Também, para esta discordância, é muito mais provável que átomos em **C<sub>2</sub>** se desloquem do que átomos em **C<sub>1</sub>**. O resultado disso é a propagação da discordância para a direita por sucessivos deslocamentos de átomos. A baixa barreira de potencial, ou seja, a baixa energia necessária fornecer para o deslocamento atômico justifica a resistência real dos cristais.

Como já mencionado, as discordâncias são fontes de tensões e deformações internas, logo é razoável supor que discordâncias próximas possam interagir através de seus campos de tensões. Taylor (1934) utilizou os resultados do trabalho de Volterra (1907) sobre o equilíbrio de corpos elásticos isotrópicos multiplamente conexos na determinação do

---

Implementação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal

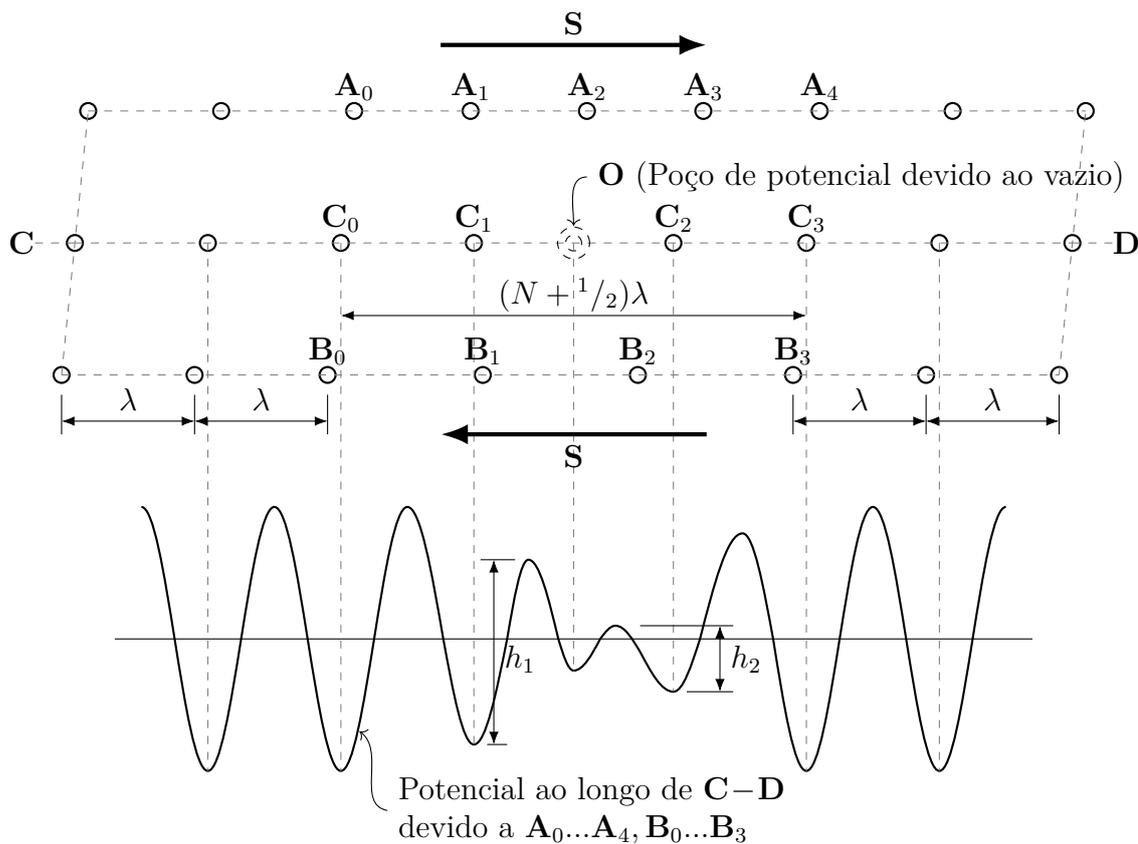


Figura 11 – Potencial interatômico próximo a uma discordância sob cisalhamento. Fonte: Taylor (1934, p. 374).

campo de tensões gerado por uma discordância em aresta. Na Figura 12 é apresentada a idealização de uma discordância em aresta por um cilindro perfurado axialmente de parede cortada, cujas faces do corte são deslizadas uma em relação à outra na direção radial, um dos tipos de distorções analisadas por Volterra.

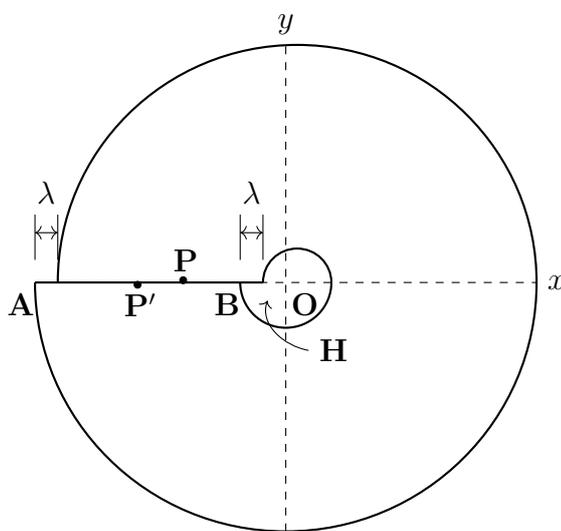


Figura 12 – Cilindro elástico perfurado axialmente com discordância de aresta. Fonte: Taylor (1934, p. 376).

Com base nestas considerações e a partir de um modelo de uma subestrutura de discordâncias, Taylor (1934) chegou à seguinte relação tensão-deformação teórica

$$S = S_T + \kappa G \sqrt{\frac{\lambda s}{L}} = S_T + \eta G \lambda \sqrt{\rho}, \quad (3.7)$$

em que  $S$  é a tensão de cisalhamento para o movimento das discordâncias dentro da subestrutura,  $S_T$  é a tensão necessária para mover uma discordância isolada,  $G$  é o módulo de cisalhamento do material,  $\lambda$  é o espaçamento interatômico,  $L$  é a dimensão do espécime (ou do grão) na direção do movimento das discordâncias,  $s$  a deformação de cisalhamento,  $\kappa$  e  $\eta$  parâmetros determinados pela geometria da distribuição e  $\rho$  a *densidade de discordâncias*. Mais precisamente, a relação  $(S - S_T) \propto \rho^{1/2}$  da Equação 3.7 é proposta por Asaro (1983, p. 16) por considerações geométricas.

O modelo de Taylor embora simplificado conseguiu reproduzir os resultados experimentais da época e evidenciou a interação entre as discordâncias como um importante fator no endurecimento por deformação. Da Equação 3.7 resulta que o endurecimento está ligado à densidade de discordâncias.

A descrição completa de uma discordância envolve a especificação de seu sentido e do vetor deslocamento do material e a orientação do vetor deslocamento em relação à discordância. Na Figura 13 apresenta-se uma ilustração de uma discordância em aresta e seu vetor deslocamento e um outro tipo de discordância proposta por Burgers (1934), a *discordância helicoidal* ou *discordância de Burgers*. O vetor deslocamento é denominado *vetor de Burgers* e denotado por  $\mathbf{b}$ .

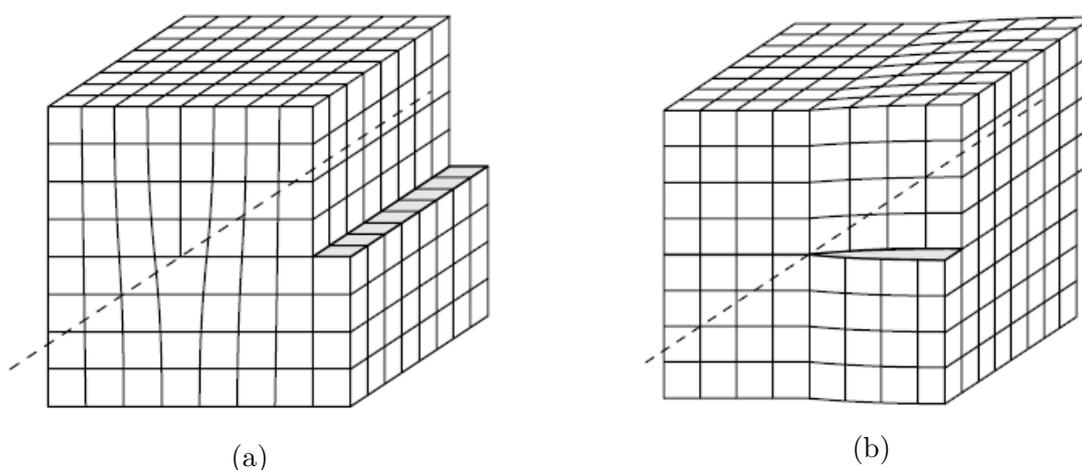


Figura 13 – Discordâncias (a) de aresta e (b) helicoidal. Fonte: Sólyom (2007, p. 284-285).

Seja  $\mathbf{t}$  o vetor unitário tangente à discordância, a discordância em aresta é caracterizada por  $\mathbf{t} \cdot \mathbf{b} = 0$  e a discordância helicoidal por  $\mathbf{t} \cdot \mathbf{b} = \pm \|\mathbf{b}\|$ ; ou seja, discordâncias em aresta são ortogonais ao vetor deslocamento e discordâncias helicoidais são paralelas ao vetor  
Implementação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal

deslocamento. Discordâncias com caráter intermediário aos de discordâncias em aresta e discordâncias helicoidais são denominadas *discordâncias mistas* (Figura 14).

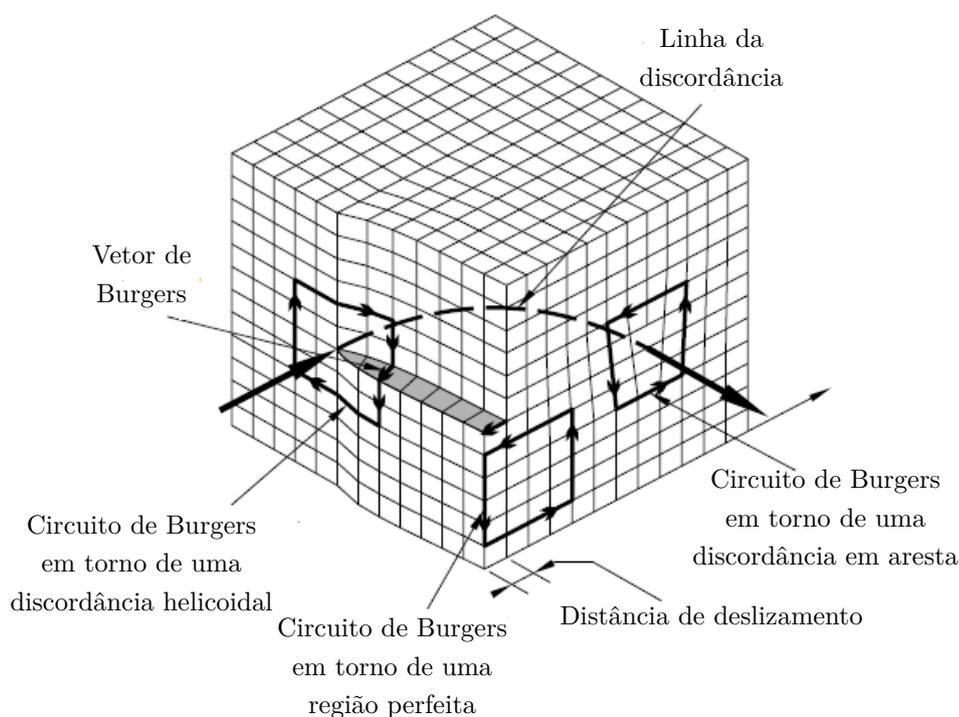


Figura 14 – Discordância mista. Fonte: Sólyom (2007, p. 287).

“A lei de Schmid então pode ser reinterpretada em termos de uma força crítica necessária para mover ou gerar discordâncias. Essa força é definida de maneira que seja energeticamente conjugada ao deslizamento e então é equivalente à tensão de cisalhamento projetada multiplicada pela magnitude de  $\mathbf{b}$ ” (ASARO, 1983, p. 14, tradução nossa).

### 3.4.1 Desvios à lei de Schmid, interação entre discordâncias e endurecimento

A mecânica de discordâncias em um cristal se manifesta de diversas formas, muitas vezes levando a desvios na lei de Schmid. Também, alguns mecanismos de interação entre discordâncias e sua multiplicação são usados para explicar o endurecimento por deformação. Tais assuntos são apenas citados neste texto.

Em alguns casos é possível que ocorra *deslizamento cruzado* entre planos cristalográficos concorrentes. Em cristais CFC por exemplo, as discordâncias podem se propagar entre diferentes planos  $\{111\}$  efetuando deslizamento cruzados. Asaro (1983, p. 17) ressalta que embora o vetor de Burgers seja um vetor de rede perfeita é possível que uma discordância dissocie-se formando *discordâncias parciais*, as quais interagem através dos seus campos de

tensões. Para uma discordância parcial é mais difícil que se ocorra deslizamento cruzado devido à interação mútua.

Nos casos em que há deslizamento simultâneo em sistemas diferentes, é possível que discordâncias de diferentes sistemas interajam formando novas discordâncias. Por exemplo, em cristais CFC sob deslizamento duplo as discordâncias dos sistemas primário e conjugado podem “reagir” formando discordâncias em um sistema no qual o deslizamento é muito difícil, chamadas *discordâncias de Lomer*. Também discordâncias podem reagir formando uma estrutura segmentada cujos nós são relativamente estáveis e dificultam o movimento das discordâncias originais. Em ambos os casos a interação entre discordâncias leva ao endurecimento do material (ASARO, 1983, p. 20-21; DIETER, 1976, p. 167-169).

Segmentos de discordâncias fixos entre planos cristalográficos são objetos de um tipo de multiplicação de discordâncias chamado de *fontes de Frank-Reed*. Uma ilustração do processo de multiplicação por fontes de Frank-Reed é apresentada na Figura 15. Um segmento de discordância fixado nos nós é solicitado transversalmente formando um arco. Acima de uma tensão de cisalhamento crítica o arco torna-se instável e é formado um circuito de discordância em torno do segmento original. Fontes de discordâncias são importantes na manutenção da deformação plástica.<sup>6</sup>

### 3.4.2 Medições do endurecimento latente

Asaro (1983, p. 26-28) também menciona que o endurecimento latente pode ser medido de duas maneiras. O primeiro método consiste em deformar monocristais em deslizamento simples em um sistema primário e então usinar o espécime para deslizamento simples em um sistema cristalográfico diferente do primeiro. Obtém-se então uma razão entre as tensões de escoamento do sistema primeiramente latente (secundário) com o sistema primário. Outro método envolve a medição da rotação da rede em função da deformação de um monocristal orientado para deslizamento simples (como as experiências de Taylor e Elam) e então as discrepâncias com as previsões para deslizamento simples (por exemplo, extensão da ultrapassagem) são utilizadas para inferir a magnitude do endurecimento latente.

As observações experimentais podem ser descritas através da relação de endurecimento

<sup>6</sup> Além destes mecanismos, a resistência ao escoamento e endurecimento dependem fortemente do tamanho médio dos grãos. Evidências experimentais indicam em geral uma correspondência com a relação empírica de Hall-Petch  $\sigma_y = \sigma_0 + k_y d^{-\frac{1}{2}}$ , com  $\sigma_y$  a tensão de escoamento,  $\sigma_0$  uma constante relacionada com a resistência da rede ao movimento de discordâncias,  $k_y$  um coeficiente de resistência e  $d$  o diâmetro médio dos grãos. Fisicamente, “ $\sigma_y$  é determinada em grande parte pelo processo pelo qual o deslizamento é transferido dos grãos que escoam a menores deformações plásticas para os grãos adjacentes e não apenas pela interação de discordâncias e processos de endurecimento por deformação que ocorrem nos interiores de grãos” (ASARO, 1983, p. 24, tradução nossa).

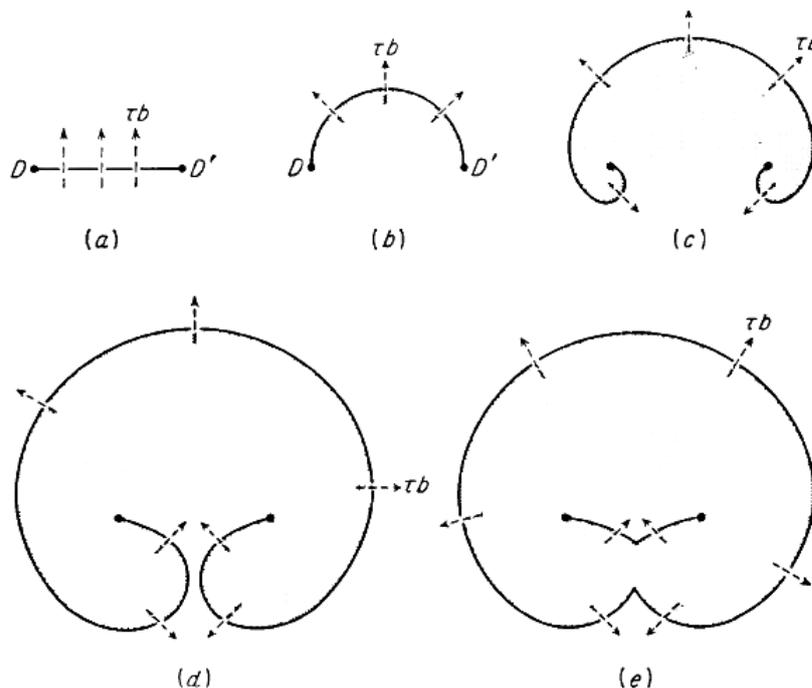


Figura 15 – Representação esquemática da operação de uma fonte de Frank-Reed. Fonte: Dieter (1976, p. 185).

*independente da taxa de deformação*

$$d\tau_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} d\gamma^{(\beta)}, \quad (3.8)$$

onde  $\tau_c^{(\alpha)}$  é a tensão projetada crítica no sistema  $\alpha$ ,  $\gamma^{(\beta)}$  é o deslizamento no sistema  $\beta$  e  $h_{\alpha\beta}$  são as taxas de endurecimento. A matriz associada a  $h_{\alpha\beta}$  é tal que os termos fora da diagonal principal representam o endurecimento latente. Algumas expressões para  $h_{\alpha\beta}$  são discutidos na seção 4.5.

Os resultados experimentais diferem dependendo do método utilizado para a medição do endurecimento latente, já que são desconsiderados diversos fatores como dependência da taxa de deformação ou de tensão. Porém há um consenso na literatura de que geralmente a razão entre o endurecimento latente e o auto-endurecimento tome valores entre 1,0 e 1,4 (seguindo principalmente as observações de Kocks (1970)), principalmente para cristais CFC.

### 3.4.3 Deslizamento não uniforme em grãos de policristais

Sabe-se que, em um cristal uniformemente tensionado, se somente um sistema de deslizamento estiver operante a deformação macroscópica geralmente ocorre de forma altamente uniforme. O mesmo não ocorre quando há mais de um sistema ativo, principalmente devido ao endurecimento latente (PIERCY; CAHN; COTTRELL, 1955) (Figura 16).

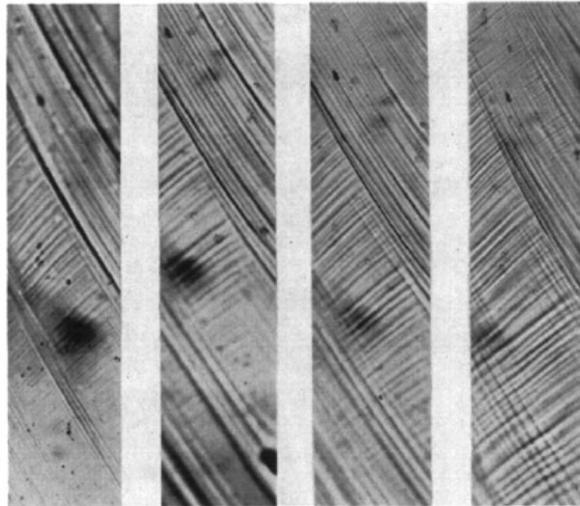


Figura 16 – Bandas de deslizamento duplo em um monocristal de *latão alfa* para diferentes graus de deformação. Fonte: Piercy, Cahn e Cottrell (1955, p. 335).

Também, em policristais, por razões de compatibilidade de deformações na interface dos grãos, observa-se em muitos casos deslizamento irregular no interior dos grãos. Modos de deslizamento irregular no interior dos grãos podem ocorrer por exemplo devido ao início de deslizamento na interface ou “colisão” de bandas de deslizamento com a interface dos grãos, induzindo deslizamentos não uniformes em seu interior. Apresenta-se na Figura 17 uma micrografia de um grão de um policristal de alumínio onde foi induzido modo de deslizamento não uniforme.

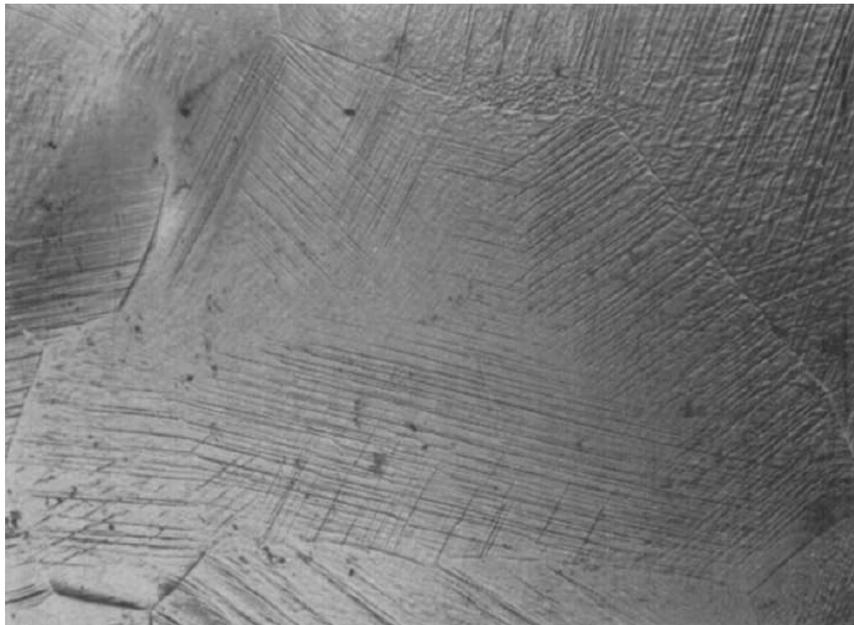


Figura 17 – Micrografia de um grão de policristal alumínico estendido a 10%. São observadas bandas devidas a deslizamento não-uniforme no interior de um grão monocristalino em cinco famílias de linhas de deslizamento. Fonte: Boas e Ogilvie (1954, p. 657).

## 4 ELASTOPLASTICIDADE EM MEIOS CRISTALINOS

Neste capítulo são apresentadas equações cinemáticas e constitutivas que descrevem a deformação elastoplástica em monocristais. Neste contexto são expostos elementos da teoria apresentada por Asaro (1983).

Aqui, a descrição macroscópica do cristal segue a linha das teorias da elasticidade e plasticidade convencionais. Para relacionar o comportamento macroscópico com a anisotropia cristalina e mecanismos microscópicos que originam a deformação plástica o cristal é concebido como um *material com estrutura interna*. Nesta classe de materiais os objetos e equações básicos da elastoplasticidade são modificados para descrever a cinemática e a cinética de elementos contidos na microestrutura.

Como tratado no Capítulo 3 a deformação plástica provém do deslizamento de porções do cristal (devido ao movimento de discordâncias) em relação a planos cristalográficos *bem definidos*. Esta observação serve de base para a decomposição do gradiente de deformações, definição do critério de escoamento plástico e construção da relação constitutiva elastoplástica. Desvios a este comportamento são observados em muitas estruturas cristalinas e sob variadas condições, porém não são tratados neste trabalho.

Para descrever os diferentes sistemas de deslizamento cristalográficos utiliza-se uma dupla de vetores diretores (unitários) que indicam os planos cristalográficos e direções de deslizamento nesses planos na configuração de referência. Um plano de deslizamento na configuração de referência é indicado através do vetor ortonormal  $\mathbf{m}^{(\alpha)}$  e uma direção de deslizamento neste plano pelo vetor unitário colinear  $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ . Uma dupla  $\{\mathbf{m}^{(\alpha)}, \mathbf{s}^{(\alpha)}\}$  é chamada de um *sistema de deslizamento*  $\alpha$ .

### 4.1 CINEMÁTICA DA DEFORMAÇÃO EM MONOCRISTAIS

Existem três mecanismos básicos de deformação e reorientação das fibras do material: deslizamento plástico, rotações de corpo rígido e deformação elástica da rede. A relação entre duas configurações materiais é descrita por transformações lineares dependentes da posição das partículas materiais. Um vetor infinitesimal  $d\mathbf{X}$  na configuração de referência (inicial)  $\mathcal{B}$  é relacionado com o vetor infinitesimal  $d\mathbf{x}$  na configuração atual  $\mathcal{B}^*$  através da transformação

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{X},$$

em que  $\mathbf{F}$  é o gradiente de deformações.

Para descrever a deformação em termos dos três mecanismos básicos Asaro (1983) utiliza a decomposição multiplicativa do gradiente de deformações em uma parcela que descreve deformações puramente plásticas  $\mathbf{F}^p$  e uma parcela que descreve deformações elásticas e rotações da rede cristalina  $\mathbf{F}^*$ ,

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{F}^p.$$

A Figura 18 apresenta um diagrama desta decomposição.

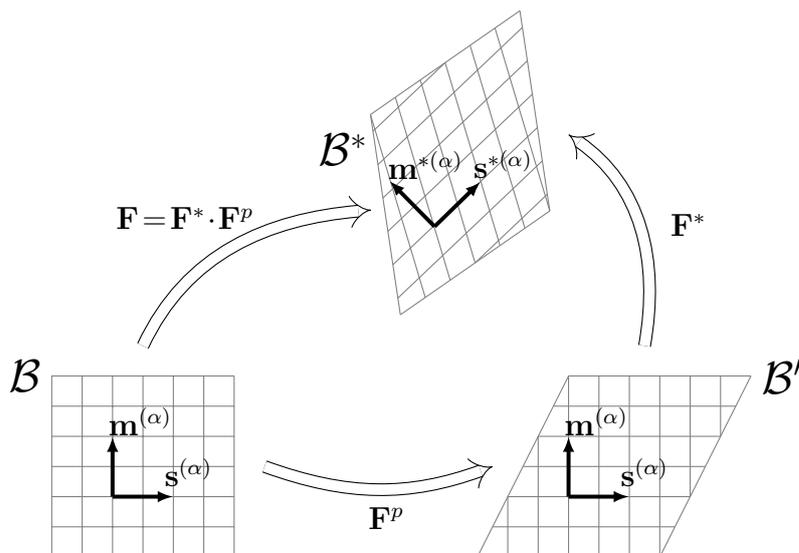


Figura 18 – Decomposição do gradiente de deformações. À esquerda a configuração de referência  $\mathcal{B}$ , à direita a configuração intermediária  $\mathcal{B}'$  e acima a configuração atual  $\mathcal{B}^*$ . Fonte: Asaro (1983, p. 38).

A deformação plástica está relacionada com o movimento de discordâncias através da rede cristalina preservando a estrutura do cristal. Então a parte plástica do gradiente de deformações não modifica a orientação dos vetores diretores dos sistemas de deslizamento cristalográficos (isto é representado na Figura 18, onde não há diferenciação da orientação de um sistema de deslizamento entre a configuração de referência e a configuração intermediária  $\mathcal{B}'$ ). Logo  $\mathbf{F}^*$  é o único termo que descreve deformações na rede. Os vetores de um sistema cristalográfico na configuração atual são obtidos pelas transformações<sup>1</sup>

$$\mathbf{s}^{*(\alpha)} = \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{m}^{*(\alpha)} = \mathbf{m}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1}. \quad (4.1)$$

Seja  $\mathbf{L}$  o gradiente de velocidades, sabe-se da seguinte relação:  $\mathbf{L} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}} \cdot (\mathbf{F})^{-1}$ ; e em

<sup>1</sup> Esta relação é obtida observando a preservação da condição de ortogonalidade  $\mathbf{m}^{*(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{*(\alpha)} = \mathbf{m}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} = 0$  entre as configurações  $\mathcal{B}'$  e  $\mathcal{B}^*$ . Dessa forma,  $\mathbf{m}^{*(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{*(\alpha)} = \mathbf{m}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{m}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{I} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{m}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1} \cdot \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} = (\mathbf{m}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1}) \cdot \mathbf{s}^{*(\alpha)}$ . Observa-se também que  $\mathbf{m}^{*(\alpha)}$  e  $\mathbf{s}^{*(\alpha)}$  não são necessariamente unitários.

termos da cinemática cristalina,

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot (\mathbf{F})^{-1} = \dot{\mathbf{F}}^* \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1} + \mathbf{F}^* \cdot \dot{\mathbf{F}}^p \cdot (\mathbf{F}^p)^{-1} \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1}. \quad (4.2)$$

É conveniente dividir o gradiente de velocidades em suas partes simétrica e antissimétrica, respectivamente  $\mathbf{D}$  e  $\mathbf{\Omega}$ , através da decomposição aditiva  $\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{\Omega}$ .  $\mathbf{D}$  representa o tensor velocidade de deformação e  $\mathbf{\Omega}$  o tensor velocidade de rotação. Ainda, é possível dividir  $\mathbf{D}$  e  $\mathbf{\Omega}$  em partes puramente elástica (com superíndice  $*$ ) e elastoplástica (com superíndice  $p$ ),

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^* + \mathbf{D}^p, \quad \mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}^* + \mathbf{\Omega}^p.$$

A Equação 4.2 sugere uma decomposição aditiva  $\mathbf{L} = \mathbf{L}^* + \mathbf{L}^p$  através das relações

$$\mathbf{L}^* = \mathbf{D}^* + \mathbf{\Omega}^* = \dot{\mathbf{F}}^* \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1}, \quad \mathbf{L}^p = \mathbf{D}^p + \mathbf{\Omega}^p = \mathbf{F}^* \cdot \dot{\mathbf{F}}^p \cdot (\mathbf{F}^p)^{-1} \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1}. \quad (4.3)$$

Das Equações 4.1 e 4.3 são obtidas as relações

$$\dot{\mathbf{s}}^{*(\alpha)} = \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)} = \dot{\mathbf{F}}^* \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1} \cdot \mathbf{s}^{*(\alpha)} = \mathbf{L}^* \cdot \mathbf{s}^{*(\alpha)}, \quad (4.4)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^{*(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^* = \mathbf{m}^{(\alpha)} &\implies \dot{\mathbf{m}}^{*(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^* + \mathbf{m}^{*(\alpha)} \cdot \dot{\mathbf{F}}^* = 0 \\ &\implies \dot{\mathbf{m}}^{*(\alpha)} = -\mathbf{m}^{*(\alpha)} \cdot \dot{\mathbf{F}}^* \cdot (\mathbf{F}^*)^{-1} \\ &= -\mathbf{m}^{*(\alpha)} \cdot \mathbf{L}^* \end{aligned} \quad (4.5)$$

para as taxas de variação de  $\mathbf{s}^{*(\alpha)}$  e  $\mathbf{m}^{*(\alpha)}$  respectivamente.

Seja  $\gamma^{(\alpha)}$  o deslizamento<sup>2</sup> no sistema cristalográfico  $\{\mathbf{m}^{(\alpha)}, \mathbf{s}^{(\alpha)}\}$  ativo, o gradiente plástico de velocidades  $\mathbf{L}^p$  na configuração atual  $\mathcal{B}^*$  pode ser escrito como

$$\mathbf{D}^p + \mathbf{\Omega}^p = \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)}, \quad (4.6)$$

em que  $n$  é o número de sistemas de deslizamento. Observando a Equação 4.3 verifica-se o gradiente plástico de velocidades na configuração de referência

$$\dot{\mathbf{F}}^p \cdot (\mathbf{F}^p)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}.$$

As partes plásticas dos tensores velocidades de deformação e rotação são obtidas através das partes simétrica e anti-simétrica do tensor da Equação 4.6. Então

$$\mathbf{D}^p = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{P}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{\Omega}^p = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{W}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad (4.7)$$

<sup>2</sup> Medido em relação à rede.

com

$$\mathbf{P}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} + \mathbf{m}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{*(\alpha)} \right), \quad (4.8)$$

e

$$\mathbf{W}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} - \mathbf{m}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{*(\alpha)} \right). \quad (4.9)$$

O tensor simétrico  $\mathbf{P}^{(\alpha)}$  é conhecido na literatura em geral como *tensor de Schmid*.

## 4.2 RELAÇÃO CONSTITUTIVA

Assumindo que a deformação plástica não afeta as propriedades elásticas do cristal, a relação constitutiva entre incrementos de tensão e de deformações pode ser escrita como<sup>3</sup>

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^* = \mathbf{C} : \mathbf{D}^* \quad (4.10)$$

onde  $\mathbf{C}$  é o tensor constitutivo elástico<sup>4</sup>;  $\dot{\boldsymbol{\tau}}^*$  é a taxa de Jaumann da tensão de Kirchoff<sup>5</sup> no referencial que rotaciona com a rede,

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^* = \dot{\boldsymbol{\tau}} - \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\Omega}^*, \quad (4.11)$$

com  $\dot{\boldsymbol{\tau}}$  a derivada material de  $\boldsymbol{\tau}$ . A tensão de Jaumann em um referencial corrotacional ao material  $\dot{\boldsymbol{\tau}}$  é

$$\dot{\boldsymbol{\tau}} = \dot{\boldsymbol{\tau}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\Omega}. \quad (4.12)$$

A diferença entre as duas taxas é

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^* - \dot{\boldsymbol{\tau}} = \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad (4.13)$$

onde

$$\boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} = \mathbf{W}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W}^{(\alpha)}$$

é um tensor simétrico dependente da rotação relativa entre o material (macroscópico) e a rede cristalina. Se a rotação relativa for nula,  $\boldsymbol{\beta}^{(\alpha)}$  se anula e, então,  $\dot{\boldsymbol{\tau}}^* = \dot{\boldsymbol{\tau}}$ .

Combinando as equações anteriores resulta, para a microestrutura do cristal, a equação constitutiva

$$\dot{\boldsymbol{\tau}} = \mathbf{C} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha=1}^n \left( \mathbf{C} : \mathbf{P}^{(\alpha)} + \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (4.14)$$

Define-se a *tensão projetada* no sistema  $\alpha$ ,  $\tau^{(\alpha)}$ , de forma que  $\tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$  seja a potência dissipada devido ou deslizamento no sistema  $\alpha$  por unidade de volume. Macroscopicamente, a potência dissipada por unidade de volume pelo material é

$$\boldsymbol{\tau} : \mathbf{D}^p = \sum_{\alpha=1}^n \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}.$$

<sup>3</sup> Seguindo Hill e Rice (1972).

<sup>4</sup> No referencial da rede cristalina.

<sup>5</sup> A tensão de Kirchoff é definida como  $\boldsymbol{\tau} = \det(\mathbf{F}) \boldsymbol{\sigma} = \frac{\rho_0}{\rho} \boldsymbol{\sigma}$ ;  $\rho_0$  e  $\rho$  respectivamente as densidades nas configurações de referência e atual.

Identifica-se então,

$$\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} = \mathbf{P}^{(\alpha)} : \boldsymbol{\tau} .$$

Sejam  $\dot{\mathbf{P}}^{(\alpha)}$  e  $\dot{\boldsymbol{\tau}}$  as derivadas materiais de  $\mathbf{P}^{(\alpha)}$  e  $\boldsymbol{\tau}$ , a taxa de variação temporal de  $\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}$  é

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \dot{\mathbf{P}}^{(\alpha)} : \boldsymbol{\tau} + \mathbf{P}^{(\alpha)} : \dot{\boldsymbol{\tau}} ,$$

e pela Equação 4.11 obtém-se

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \overset{\nabla}{\mathbf{P}}^{*(\alpha)} : \boldsymbol{\tau} + \mathbf{P}^{(\alpha)} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}^* .$$

Notemos que  $\overset{\nabla}{\mathbf{P}}^{*(\alpha)} : \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^*$ . De fato, pelas Equações 4.4 e 4.5 temos as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{P}}^{*(\alpha)} &= \mathbf{L}^* \cdot \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) - \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) \cdot \mathbf{L}^* \\ &\quad - (\mathbf{L}^*)^T \cdot \frac{1}{2} \left( \mathbf{m}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{*(\alpha)} \right) - \frac{1}{2} \left( \mathbf{m}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{*(\alpha)} \right) \cdot (\mathbf{L}^*)^T \\ &= \mathbf{D}^* \cdot \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) - \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) \cdot \mathbf{D}^* \\ &\quad - (\mathbf{D}^*)^T \cdot \frac{1}{2} \left( \mathbf{m}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{*(\alpha)} \right) - \frac{1}{2} \left( \mathbf{m}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{*(\alpha)} \right) \cdot (\mathbf{D}^*)^T \\ &\quad + \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) - \frac{1}{2} \left( \mathbf{s}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{*(\alpha)} \right) \cdot \boldsymbol{\Omega}^* \\ &\quad - (\boldsymbol{\Omega}^*)^T \cdot \frac{1}{2} \left( \mathbf{m}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{*(\alpha)} \right) - \frac{1}{2} \left( \mathbf{m}^{*(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{*(\alpha)} \right) \cdot (\boldsymbol{\Omega}^*)^T \\ &= \mathbf{D}^* \cdot \mathbf{W}^{(\alpha)} - \mathbf{W}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}^* + \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} - \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\Omega}^* ; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{P}}^{*(\alpha)} : \boldsymbol{\tau} &= \left( \mathbf{D}^* \cdot \mathbf{W}^{(\alpha)} \right) : \boldsymbol{\tau} - \left( \mathbf{W}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}^* \right) : \boldsymbol{\tau} + \left( \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} \right) : \boldsymbol{\tau} - \left( \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\Omega}^* \right) : \boldsymbol{\tau} \\ &= \left( \mathbf{W}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W}^{(\alpha)} \right) : \mathbf{D}^* + \left( \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} \right) : \boldsymbol{\tau} - \left( \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\Omega}^* \right) : \boldsymbol{\tau} \\ &= \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^* + \left( \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} \right) : \boldsymbol{\tau} - \left( \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\Omega}^* \right) : \boldsymbol{\tau} . \end{aligned}$$

Essas relações implicam em

$$\overset{\nabla}{\mathbf{P}}^{*(\alpha)} : \boldsymbol{\tau} = \dot{\mathbf{P}}^{*(\alpha)} : \boldsymbol{\tau} - \left( \boldsymbol{\Omega}^* \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} \right) : \boldsymbol{\tau} + \left( \mathbf{P}^{(\alpha)} \cdot \boldsymbol{\Omega}^* \right) : \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^* ,$$

como anunciado.

Com esta equivalência a variação temporal da tensão projetada no sistema  $\alpha$  fica

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \mathbf{P}^{(\alpha)} : \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}^* + \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^* , \quad (4.15)$$

que, aliado à Equação 4.10 fica

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(\alpha)} = \boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^* ,$$

com

$$\boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} = \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathbf{C} + \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} . \quad (4.16)$$

Das Equações 4.14 e 4.16 se  $C_{ijkl}$  for simétrico em relação aos pares de índices  $ij$  e  $kl$

$$\overline{\boldsymbol{\tau}} = \mathbf{C} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} .$$

Então,

$$\mathbf{D} = \mathbf{C}^{-1} : \overline{\boldsymbol{\tau}} + \sum_{\alpha=1}^n \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$$

com

$$\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} = \mathbf{P}^{(\alpha)} + \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \quad (4.17)$$

se  $\mathbf{C}^{-1}$  existir. Por fim, devido a simetria de  $\mathbf{P}^{(\alpha)}$ ,  $\mathbf{C}^{-1}$  e  $\boldsymbol{\beta}^{(\alpha)}$  as Equações 4.15 e 4.17 implicam

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \overline{\boldsymbol{\tau}}^* .$$

A Equação 4.14 em conjunto com critérios de fluxo plástico e relações de endurecimento do material são utilizados para a obtenção dos  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ . Na próxima seção são apresentados estes conceitos e o procedimento para a obtenção.

### 4.3 LEI DE SCHMID E ENDURECIMENTO INDEPENDENTE DA TAXA DE DEFORMAÇÃO

Como mencionado no Capítulo 3, seção 3.1, a lei de Schmid da tensão projetada crítica é uma aproximação experimental em cristais CFC, dado que a micromecânica do deslizamento sugere que desvios a esse comportamento existe. Porém, como cristais deformados em tração ou compressão a taxas quase-estáticas geralmente seguem a lei de Schmid, esta fornece um ponto de partida na formulação de leis de endurecimento por deformação ou relações cinéticas para o movimento de discordâncias<sup>6</sup>.

Segundo o critério de Schmid o fluxo plástico em um sistema  $\alpha$  começa quando a tensão projetada nesse sistema atinge um valor crítico,  $\tau_c^{(\alpha)}$ , determinado por particularidades microestruturais tais como densidade de discordâncias. O conjunto dos sistemas para os quais  $\tau^{(\alpha)} = \tau_c^{(\alpha)}$  é chamado conjunto de sistemas *potencialmente ativos*. Do contrário, se  $\tau^{(\alpha)} < \tau_c^{(\alpha)}$  o sistema é *não-crítico*<sup>7</sup>.

O endurecimento do cristal (por deformação plástica) é descrito pelo aumento na tensão projetada crítica em função dos deslizamentos, como apresentado na Equação 3.8. Para

<sup>6</sup> Tais relações podem ser alteradas para considerar fenômenos de *deslizamento cruzado*, *escalagem* ou outros processos micromecânicos que são influenciados por outras componentes da tensão que não a tensão projetada.

<sup>7</sup> Todo sistema não-crítico é inativo.

que um sistema crítico seja considerado *ativo* em um intervalo de deformação deve-se ter  $\tau^{(\alpha)} = \tau_c^{(\alpha)}$  durante todo o processo de deformação plástica, ou seja,  $\tau^{(\alpha)}$  deve aumentar à mesma taxa que o endurecimento do material. Com base nestas observações, entre os sistemas potencialmente ativos tem-se

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \quad \text{para os sistemas ativos,}$$

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} \leq \dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad \text{para os sistemas inativos;}$$

e para os sistemas não-críticos somente

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} < \dot{\tau}_c^{(\alpha)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0.$$

$h_{\alpha\beta}$  é um tensor de taxas de endurecimento *instantâneas* que relaciona o endurecimento nos sistemas de deslizamento com as taxas de deslizamento. Esta descrição permite contabilizar tanto o auto-endurecimento (quando  $\alpha = \beta$ ) como o endurecimento latente (quando  $\alpha \neq \beta$ ).

O conjunto dos sistemas cristalográficos ativos é chamado de um *modo de deslizamento*. Para incluir a possibilidade de fluxo plástico reverso, é comum definir separadamente sistemas positivos e negativos,  $\{\mathbf{m}^{(\alpha)}, \mathbf{s}^{(\alpha)}\}$  e  $\{\mathbf{m}^{(\alpha)}, -\mathbf{s}^{(\alpha)}\}$ .

Uma lei de normalidade acompanha a lei de Schmid, conforme segue. Se o estado de tensões está sobre a superfície de plastificação no espaço de tensões então mudanças no estado de tesões que caracterizam uma resposta puramente elástica tendem a diminuir  $\tau^{(\alpha)}$ , i. e.,

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^* = \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \overline{\boldsymbol{\tau}}^* \leq 0.$$

Portanto se for observado o espaço de tensões como um espaço euclidiano 9-dimensional (devido às nove componentes do tensor de tensões) então  $\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)}$  corresponde a um vetor normal exterior à superfície de escoamento do sistema  $\alpha$  no espaço de tensões (normalidade plástica). A última equação pode ser escrita como

$$\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \mathbf{C} : \mathbf{D}^* = \mathbf{C} : \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^* \leq 0,$$

observando as simetrias de  $\mathbf{C}$  e de  $\mathbf{D}^*$ .

O escoamento para os sistemas críticos é caracterizado por

$$\boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^* = \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \overline{\boldsymbol{\tau}}^* = \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \quad \text{para os sistemas ativos e} \quad (4.18)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} : \mathbf{D}^* = \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \overline{\boldsymbol{\tau}}^* \leq \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad \text{para os sistemas inativos.} \quad (4.19)$$

Com auxílio da Equação 4.7 as Equações 4.18 e 4.19 podem ser expressas em termos do tensor  $\mathbf{D}$  pelas relações

$$\boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} : \mathbf{D} = \sum_{\beta=1}^n g_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \quad \text{para os sistemas ativos e}$$

$$\boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} : \mathbf{D} \leq \sum_{\beta=1}^n g_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad \text{para os sistemas inativos,}$$

nas quais

$$g_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} + \boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} : \mathbf{P}^{(\beta)} = h_{\alpha\beta} + \mathbf{P}^{(\alpha)} : \mathbf{C} : \mathbf{P}^{(\beta)} + \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} : \mathbf{P}^{(\beta)} .$$

Em termos do tensor  $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ , pela Equação 4.13 as relações ficam

$$\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \bar{\boldsymbol{\tau}} = \sum_{\beta=1}^n k_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \quad \text{para os sistemas ativos e}$$

$$\boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \bar{\boldsymbol{\tau}} \leq \sum_{\beta=1}^n k_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad \text{para os sistemas inativos,}$$

nas quais

$$k_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} - \boldsymbol{\mu}^{(\alpha)} : \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} = h_{\alpha\beta} - \mathbf{P}^{(\alpha)} : \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} - \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} : \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} .$$

Se a matriz associada ao tensor  $g_{\alpha\beta}$  for positiva definida,  $g_{\alpha\beta}$  é invertível e, com  $\mathbf{D}$  prescrito,

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^n (\mathbf{g}^{-1})_{\alpha\beta} \boldsymbol{\lambda}^{(\beta)} : \mathbf{D}$$

e

$$\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} = \mathbf{C}^{\text{ep}} : \mathbf{D},$$

com o tensor constitutivo elastoplástico  $\mathbf{C}^{\text{ep}}$  dado por

$$\mathbf{C}^{\text{ep}} = \mathbf{C} - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n \boldsymbol{\lambda}^{(\alpha)} (\mathbf{g}^{-1})_{\alpha\beta} \boldsymbol{\lambda}^{(\beta)} .$$

A unicidade do problema porém não é garantida já que não se garante a diagonal dominância da matriz associada ao tensor  $\mathbf{g}$  por conta do endurecimento; também pela rotação da rede em relação ao material e número de sistemas ativos.

O modelo geral apresentado acima será particularizado para as condições de pequenas deformações e ausência de rotações no Capítulo 6.

## 4.4 TENSOR CONSTITUTIVO ELÁSTICO EM PEQUENAS DEFORMAÇÕES

Um parêntese é feito nessa seção a fim de preencher a lacuna sobre a anisotropia elástica *em pequenas deformações* de sólidos cristalinos. Sabe-se que para transformações sob equilíbrio térmico o tensor de tensões  $\sigma_{ij}$  é obtido a partir da energia livre  $F$  através da relação diferencial  $\sigma_{ij} = (\partial F / \partial \epsilon_{ij})_T$ ,  $T$  a temperatura e  $\epsilon_{ij}$  o tensor de pequenas deformações. Landau e Lifshitz (1986, p. 37) menciona que a forma geral para a energia livre de um cristal sob deformação elástica é

$$F = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} ,$$

na qual  $C_{ijkl}$  é o *tensor constitutivo elástico*.

A simetria do tensor de deformações implica  $C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij}$ , ou seja o tensor de elasticidade é composto em geral por 21 parâmetros elásticos independentes. Se o cristal possuir simetria suficiente algumas componentes do tensor de elasticidade relacionam-se reduzindo o número de parâmetros independentes.

Para monocristais CFC com base monoatômica (isto é, pertencentes à classe cristalina  $O_h$ ), se forem tomados os eixos cartesianos que definem a célula cúbica (conforme a Figura 6, p. 12), o tensor de elasticidade fica limitado às seis componentes  $C_{1111}$ ,  $C_{3333}$ ,  $C_{1122}$ ,  $C_{1133}$ ,  $C_{1212}$  e  $C_{1313}$  devido aos eixos possuírem simetria rotacional de quarta ordem. Além disso, rotações de  $\pi/2$  em torno dos eixos  $x_1$  e  $x_2$  também mantém a simetria da célula (pelas transformações  $x_1 \rightarrow x_1$ ,  $x_2 \rightarrow -x_3$ ,  $x_3 \rightarrow x_2$  e  $x_1 \rightarrow x_3$ ,  $x_2 \rightarrow x_2$ ,  $x_3 \rightarrow -x_1$  respectivamente), resultando em somente três componentes independentes:  $C_{1111}$ ,  $C_{1122}$  e  $C_{1212}$  (LANDAU; LIFSHITZ, 1986, p. 41). A energia livre nesse caso assume a forma

$$F = \frac{1}{2} C_{1111} (\epsilon_{11}^2 + \epsilon_{22}^2 + \epsilon_{33}^2) + C_{1122} (\epsilon_{11} \epsilon_{22} + \epsilon_{11} \epsilon_{33} + \epsilon_{22} \epsilon_{33}) \\ + 2 C_{1212} (\epsilon_{12}^2 + \epsilon_{13}^2 + \epsilon_{23}^2) .$$

No caso do monocristal solicitado em estado plano de deformações conforme indicado na Figura 19, caso que será de fundamental importância nos capítulos seguintes, a simetria rotacional de quarta ordem não é preservada devido a um fator  $\sqrt{2}$  na relação entre as dimensões da célula no plano. Porém, em primeira aproximação e sobretudo nos casos onde as deformações elásticas são de menor importância que as plásticas<sup>8</sup> é conveniente considerar a simetria ou até mesmo uma relação isotrópica para o monocristal. Esta simplificação é adotada em geral na aplicação da plasticidade cristalina.

<sup>8</sup> e.g., em mecânica da fratura próximo à ponta de trincas.

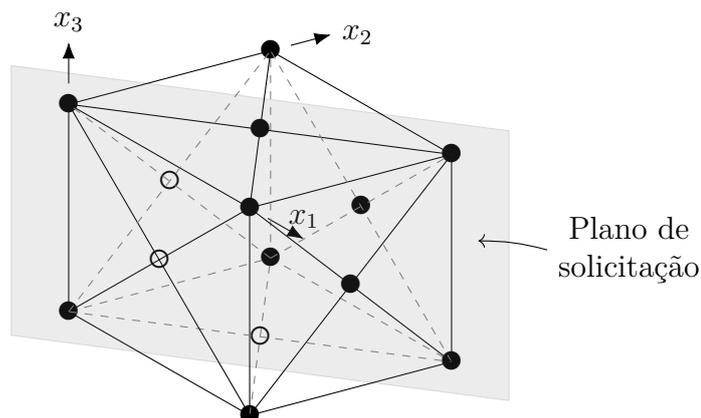


Figura 19 – Uma das possíveis orientações do plano de solicitação (em cinza) em estado plano de deformações em relação à estrutura de um monocristal CFC.

Para um material isotrópico sabe-se que as componentes  $C_{1111}$  e  $C_{1122}$  do tensor de elasticidade são relacionadas e este pode ser escrito como

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) ,$$

com  $\lambda$  e  $\mu$  os parâmetros independentes de Lamé.

## 4.5 O MÓDULO DE ENDURECIMENTO $H_{\alpha\beta}$

A definição da relação de endurecimento  $h_{\alpha\beta}$  deve ser tal que as observações sobre o endurecimento latente discutidas nas seções 3.2 e 3.4.2 sejam cumpridas. Assim, diversos autores propuseram formas para  $h_{\alpha\beta}$  de maneira que as observações experimentais fossem satisfeitas. Nas seções a seguir são descritos alguns modelos de endurecimento em monocristais utilizados na literatura.

O grau do endurecimento latente é um fator decisivo na solução dos problemas elastoplásticos. Em plasticidade independente da taxa de deformação, por exemplo, altos valores do endurecimento latente podem facilmente levar a perda de unicidade no modo de deslizamento; dessa forma o problema matemático torna-se insolúvel (ou instável).

### 4.5.1 Endurecimento de Taylor

Taylor (1934) propôs um modelo de endurecimento isotrópico para monocristais no qual todos os sistemas endurecem igualmente a um valor constante  $h_{\alpha\beta} = H_0$ . Obviamente este modelo não pode descrever o alto endurecimento latente característico de alguns cristais. Porém, por ser mais simples, é passível de ser usado em primeira aproximação.

### 4.5.2 Endurecimento de Hutchinson-Asaro

Hutchinson (1970) e Asaro (1979) sugeriram uma regra de endurecimento da forma

$$h_{\alpha\beta} = q H(\gamma) + (1 - q) H(\gamma) \delta_{\alpha\beta} \quad (4.20)$$

onde  $H(\gamma)$  é a função de auto-endurecimento,  $\delta_{\alpha\beta}$  o delta de Kronecker e  $q$  é o fator de endurecimento latente, um parâmetro do material. O deslizamento  $\gamma$  em situações de múltiplos sistemas ativos é tomado como a soma dos deslizamentos nos sistemas  $\alpha$

$$\gamma = \sum_{(\alpha)} |\gamma^{(\alpha)}|. \quad (4.21)$$

Peirce, Asaro e Needleman (1982) utilizam duas dependências de  $H$  em relação  $\gamma$ , a de endurecimento hiperbólico e a de endurecimento de potência. A função de endurecimento hiperbólico é

$$H(\gamma) = H_0 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{H_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right) \quad (4.22)$$

onde  $H_0$  é o endurecimento inicial,  $\tau_0$  é a tensão crítica inicial e  $\tau_s$  representa o valor de saturação da tensão. Como esta função tende rapidamente a zero, é apropriada para materiais pouco endurecíveis, como ligas cristalinas pouco dúcteis. A função de endurecimento de potência é

$$H(\gamma) = H_0 \left( \frac{H_0 \gamma}{n \tau_0} + 1 \right)^{n-1} \quad (4.23)$$

onde  $n$  é o expoente de endurecimento. Esse tipo de endurecimento é adequado para cristais puros. A variação das funções de endurecimento com  $\gamma$  é apresentada na Figura 20.

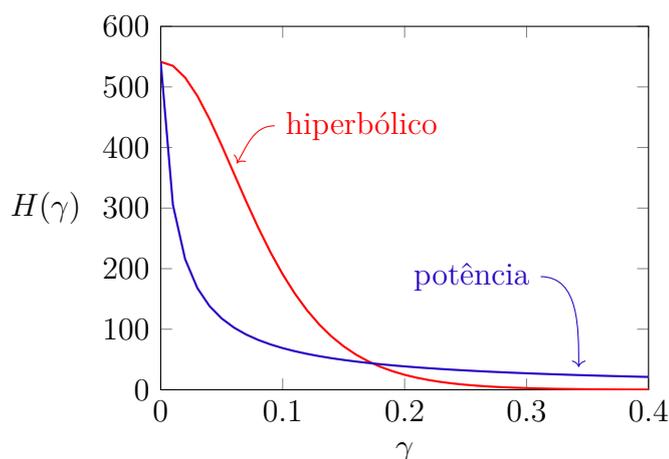


Figura 20 – Variação de  $H(\gamma)$  com  $\gamma$  para endurecimentos hiperbólico e de potência

A faixa de valores observada para o parâmetro  $q$  geralmente varia entre 1,0 e 1,4 (PEIRCE; ASARO; NEEDLEMAN, 1982). Observa-se um fator de endurecimento latente ser superior à unidade faz com que o módulo dos valores dos elementos não-diagonais do tensor  $h_{\alpha\beta}$  superem os diagonais.

## 5 FRATURA EM CRISTAIS METÁLICOS

### 5.1 MULTIESCALA DA FRATURA EM METAIS

Sabe-se que a resposta de um material à fratura depende principalmente dos processos físicos ocorridos na ponta de trincas. A micromecânica da fratura em geral envolve ampla faixa de escalas materiais e temporais. Van der Giessen e Needleman (2002) dissertam sobre as escalas materiais relevantes na simulação de cristais metálicos à temperatura ambiente, em que a dissipação plástica na propagação de trincas é predominantemente dirigida pelo movimento de discordâncias.

Nesse contexto são apresentados dois casos limites: fratura frágil, com baixo movimento de discordâncias através da rede cristalina e propagação de fissuras por clivagem; e fratura dúctil, na qual há extensiva atividade de discordâncias antecedendo fratura e provocando forte relaxação de tensões na ponta da trinca, conduzindo prolongada abertura e arredondamento da ponta e limitando fratura por clivagem. O foco desta exposição é na situação intermediária, em que a ponta da trinca é submetida à fratura por clivagem juntamente com elevado fluxo plástico por movimento de discordâncias.

#### 5.1.1 Escalas materiais relevantes em fratura

O objetivo da abordagem multiescala no presente caso é relacionar a resistência macroscópica à fratura com os processos físicos que levam à separação e deformação irreversível.

A Figura 21 ilustra algumas escalas de comprimento importantes na simulação da resposta à fratura por clivagem em agregados cristalinos dúcteis. A faixa de escalas empregada para um componente (objeto macroscópico) (Figura 26a) compreendem a escala da zona plástica dirigida pelo fluxo plástico macroscópico (Figura 26b), a escala dos grãos no policristal metálico (Figura 26c), a escala dos planos de deslizamento e das discordâncias individuais (Figura 26d), e a escala atômica (Figura 26e).

Estas escalas estão conectadas de maneira que há propagação de efeitos entre elas e todas podem contribuir para a *energia de fratura* total. Van der Giessen e Needleman (2002) também apontam que os mecanismos dissipativos somente são significativos se a fratura é retardada suficientemente. Isso explica a diferença de ordens de grandeza entre energias de fratura e energias de superfície quando há fluxo plástico predominante <sup>1</sup>; a diferença

<sup>1</sup> Van der Giessen e Needleman (2002) cita Rice e Wang (1989) para valores da ordem de  $1 \text{ J/m}^2$  para energias de superfície contra  $100 \text{ J/m}^2$  para energias de fratura de cristais metálicos dúcteis.

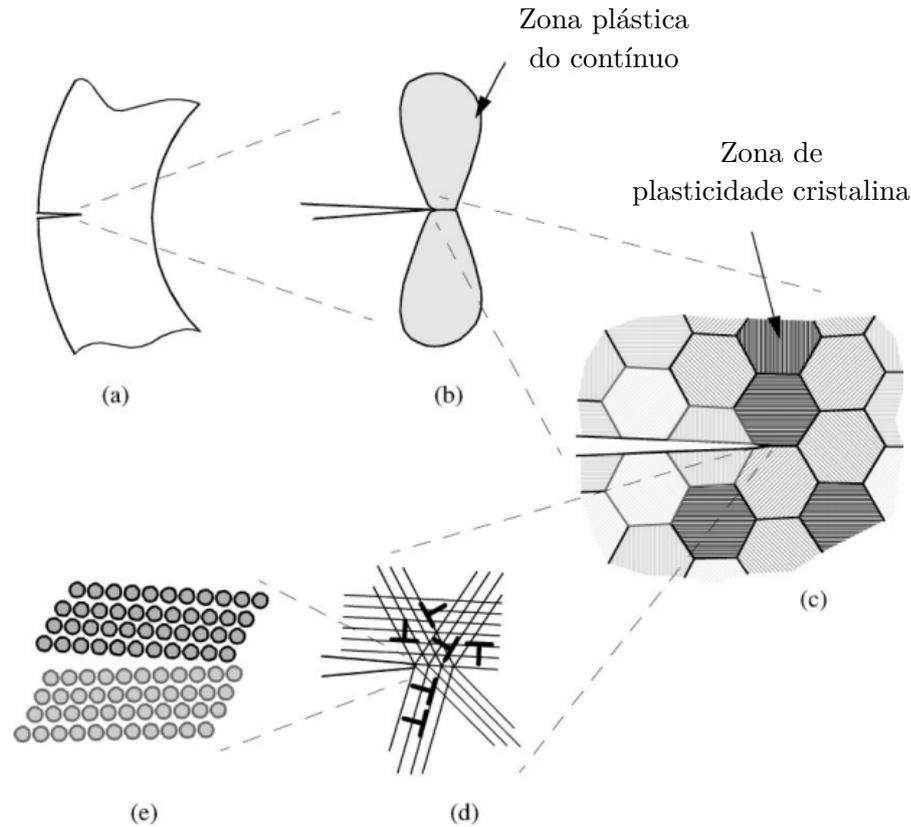


Figura 21 – Escalas relevantes na resposta à fratura em um componente macroscópico. Fonte: Van der Giessen e Needleman (2002, p. 143).

é devida à dissipação plástica na vizinhança da ponta da trinca. A seguir são discutidas algumas escalas relevantes em fratura.

#### 5.1.1.1 Escala da zona plástica

Nesta escala trata-se campos de tensões e deformações macroscopicamente, descrevendo-os através de um modelo elastoplástico isotrópico. Os campos nas proximidades da ponta de trinca para esta escala são descritos através da mecânica da fratura convencional.

#### 5.1.1.2 Escala dos grãos

Nesta escala o comportamento da peça começa a sofrer a influência da anisotropia dos grãos. Originam-se flutuações nos campos de tensões e deformações com períodos espaciais da ordem da dimensão dos grãos. Essas flutuações podem ser descritas usando modelos em plasticidade cristalina, cujas relações constitutivas descrevem o fluxo plástico nos sistemas de deslizamento devido a anisotropia intrínseca dos cristais.

#### 5.1.1.3 Escala dos planos de deslizamento e das discordâncias individuais

Devido à proximidade da ponta da trinca e à escala, o movimento das discordâncias que mediam a deformação plástica deve ser levado em conta. A dissipação de energia é

associada ao movimento de um grande número de discordâncias através da rede cristalina. Tais discordâncias são geradas pela própria ponta ou por fontes secundárias próximas e geram concentração de tensões localizadas que originam flutuações no campo de tensões ao decorrer do movimento. O modelo adequado para descrever o comportamento do material nesta escala é o de *discordâncias discretas*.

#### 5.1.1.4 Escala atômica

A separação é originada na escala dos átomos, dentro da zona plástica monocristalina. Os campos de tensões induzidos pelas escalas superiores são transmitidos a esta escala e são responsáveis pelo rompimento das ligações atômicas quando superada a resistência de ligação. Este comportamento pode ser descrito por um modelo de zonas coesivas.

Dessa forma, a criação de novas superfícies (fratura) é altamente localizada na escala atômica, mas é dirigida pelo carregamento macroscópico comunicado à escala atômica pelas demais escalas superiores de forma encadeada.

## 5.2 MODELOS ANALÍTICOS DE TRINCAS EM MONOCRISTAIS

### 5.2.1 Modelo de Rice (1987) para trinca em monocristais sob EPD

Em um trabalho pioneiro, Rice (1987) obteve assintoticamente soluções para campos de tensões e deformações próximo à ponta de trincas solicitadas a tração normal em monocristais CFC e CCC elastoplásticos perfeitos sob estado plano de deformações (EPD).

São examinadas as condições dos campos de trincas estacionárias e com crescimento quase-estático. A abordagem adotada por este autor não consiste a solução elastoplástica completa, ao invés disso se apóia em considerações de análise limite. A determinação dos campos é auxiliada por análise de condições físicas necessárias cumprir em determinadas regiões, atendendo a descontinuidades intrínsecas do problema.

Rice (1987) considera duas orientações de trinca relativas a rede cristalina; porém, neste trabalho, será abordada somente uma das orientações <sup>2</sup>. Assume-se que os cristais tenham somente alguns sistemas de deslizamento possíveis e fluxo plástico baseado no critério de Schmid.

<sup>2</sup> Será abordado a orientação encontrada com maior frequência na literatura. A outra orientação é análoga à apresentada.

### 5.2.1.1 Condições de contorno do modelo e sistemas efetivos

A ponta da trinca é desenvolvida na direção cristalográfica  $[1\bar{1}0]$ . A trinca é situada no plano  $(001)$  e direção  $[110]$ . Estas direções concordam com as condições impostas em estudos experimentais de fratura em cristais metálicos CFC<sup>3</sup>. As orientações são apresentadas na Figura 22<sup>4</sup>.

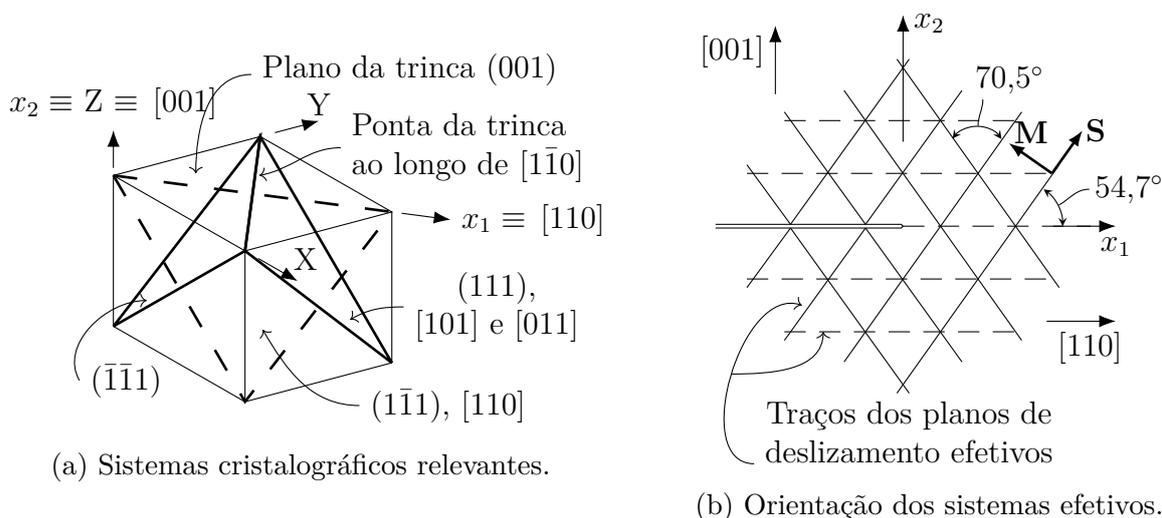


Figura 22 – Orientação do plano de carregamento em relação às direções cristalográficas em monocristal CFC.  $\{x_1, x_2\}$  definem o plano e o triedro  $\{X, Y, Z\}$  define o sistema de coordenadas vinculado ao cristal (utilizado para numeração dos sistemas cristalográficos em termos dos índices de Miller). Fonte: Rice (1987, p. 318).

A componente  $\epsilon_{33}$  do tensor de deformações é nula em EPD. Para análise perfeitamente plástica, a parte elástica  $\epsilon_{33}^e$ , é restringida a pequenos valores; logo a parte plástica  $\epsilon_{33}^p = \epsilon_{33} - \epsilon_{33}^e$  também deve ser restringida na ponta da trinca em EPD. Este raciocínio leva à constatação de que deslizamentos na direção de  $x_3$  não concordam com *grandes* deformações plásticas e portanto não devem contribuir para a *singularidade* na ponta da trinca. Assim, para as orientações consideradas, apenas deslizamentos nos planos  $(111)$ ,  $(\bar{1}\bar{1}1)$ ,  $(1\bar{1}1)$  e  $(\bar{1}11)$  são possíveis.

Para atender a compatibilidade cinemática (e observando a simetria das células cristalinas) é assumido que o cisalhamento no planos cristalográficos envolve quantidades idênticas e simultâneas de deslizamento em cada direção cristalográfica, de forma que componentes na direção  $x_3$  dos deslizamentos possam se anular. Apoiando-se nesta observação, Rice (1987) introduziu o conceito de *sistemas de deslizamento efetivos*.

<sup>3</sup> “Estas direções são frequentemente, mas não universalmente, encontradas em estudos experimentais de propagação de trincas, seja por clivagem rápida, fadiga ou propagação quimicamente assistida em metais dúcteis de estrutura FCC e BCC” (RICE, 1987, p. 317, tradução nossa).

<sup>4</sup> O triedro  $\{X, Y, Z\}$  da Figura 22 é equivalente ao triedro  $\{x_1, x_2, x_3\}$  da Figura 6.

Em redes CFC deslizamentos nos planos cristalográficos (111) e  $(\bar{1}\bar{1}1)$  ocorrem simultaneamente nas famílias de direções cristalográficas  $\langle 101 \rangle$  e  $\langle 0\bar{1}1 \rangle$ <sup>5</sup>, resultando na direção efetiva de deslizamento  $\langle 112 \rangle$ <sup>6</sup>. Sistemas que contém os planos cristalográficos (1 $\bar{1}$ 1) e ( $\bar{1}$ 11) correspondem ao sistema efetivo cujo plano é (001) e direção  $\langle 110 \rangle$ <sup>7</sup>. Deformações plásticas não correspondentes com os sistemas de deslizamento efetivos são desconsiderados por Rice (1987).

No presente trabalho os sistemas de deslizamento efetivos são numerados conforme a Figura 23. Na Tabela 1 é apresentada a correspondência entre sistemas de deslizamento cristalográficos e sistemas de deslizamento efetivos adotados no trabalho corrente. Para os fins desejados o sentido dos deslizamentos é dispensável e as direções de deslizamentos dos sistemas efetivos são tomadas de forma a facilitar o tratamento do problema.

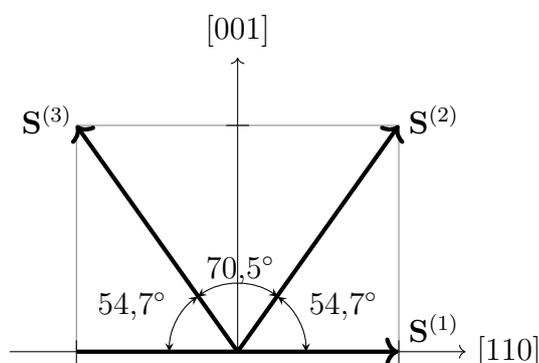


Figura 23 – Numeração adotada para os sistemas de deslizamento efetivos.

| Sistema n.º                 | (1)                      | (2)                      | (3)                        |
|-----------------------------|--------------------------|--------------------------|----------------------------|
| <i>Cristal CFC efetivo</i>  | (011)[110]               | $(\bar{1}\bar{1}1)[112]$ | (111)[ $\bar{1}\bar{1}2$ ] |
| Sistema cristalográfico (a) | $(\bar{1}\bar{1}1)[110]$ | $(\bar{1}\bar{1}1)[101]$ | (111)[ $\bar{1}01$ ]       |
| Sistema cristalográfico (b) | $(\bar{1}11)[110]$       | $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ | (111)[ $0\bar{1}1$ ]       |

Tabela 1 – Correspondência entre sistemas de deslizamento cristalográficos e sistemas efetivos. Fonte: Niordson e Kysar (2014, p. 41).

### 5.2.1.2 Tensão crítica dos sistemas efetivos

Observa-se a seguir a relação entre a tensão crítica de um sistema de deslizamento efetivo e a de seus sistemas cristalográficos correspondentes.

<sup>5</sup> Nestes planos não há deslizamento na direção cristalográfica  $\langle 110 \rangle$  pois esta direção é colinear à Z.

<sup>6</sup> Aqui, direção efetiva se refere à composição de duas ou mais direções.

<sup>7</sup> Os sistemas efetivos em redes CCC são definidos analogamente em redes, porém ficam fora do escopo deste trabalho.

Seja o sistema efetivo  $\alpha$  relacionado com dois sistemas cristalográficos  $\alpha a$  e  $\alpha b$ , ambos com tensão crítica  $\tau_c$ . A condição de deslizamento para os sistemas cristalográficos é

$$m_i^{(\alpha a)} \sigma_{ij} s_j^{(\alpha a)} = \pm \tau_c$$

com  $i, j$  tomando os valores 1 e 2. Então, é possível escrever a condição de escoamento para o sistema efetivo correspondente como

$$M_i^{(\alpha)} \sigma_{ij} S_j^{(\alpha)} = \pm \tau_c^{(\alpha)} = \pm \beta^{(\alpha)} \tau_c \quad (5.1)$$

em que  $\{\mathbf{M}^{(\alpha)}, \mathbf{S}^{(\alpha)}\}$  é o sistema efetivo  $\alpha$  e  $\beta^{(\alpha)}$  é uma constante de correção esperada existir. É fácil perceber que

$$\beta^{(\alpha)} = \frac{2 M_i^{(\alpha)} S_j^{(\alpha)}}{m_i^{(\alpha a)} s_j^{(\alpha a)} + m_i^{(\alpha b)} s_j^{(\alpha b)}} \quad (5.2)$$

para qualquer  $i, j$ . Na Figura 24 são apresentados os vetores diretores dos sistemas de deslizamento cristalográficos e efetivos relevantes para um cristal CFC.

|   |  |
|---|--|
| <b>Sistema (1):</b>   |  |
| $\mathbf{m}^{(1a)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{6}}\right)$  | $\mathbf{s}^{(1a)} = (1, 0, 0)$  |
| $\mathbf{m}^{(1b)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{-2}{\sqrt{6}}\right)$ | $\mathbf{s}^{(1b)} = (1, 0, 0)$  |
| $\mathbf{M}^{(1)} = (0, 1, 0)$  | $\mathbf{S}^{(1)} = (1, 0, 0)$   |
| <b>Sistemas (2):*</b>   |  |
| $\mathbf{m}^{(2a)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$ | $\mathbf{s}^{(2a)} = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2}\right)$  |
| $\mathbf{m}^{(2b)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$ | $\mathbf{s}^{(2b)} = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{-1}{2}\right)$ |
| $\mathbf{M}^{(2)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)$  | $\mathbf{S}^{(2)} = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{6}}, 0\right)$      |
| * O sistema 3 é análogo.  |  |

Figura 24 – Quadro representativo dos vetores diretores dos sistemas de deslizamento cristalográficos e efetivos 1 e 2 para o cristal CFC.

Se aplicados os valores da Figura 24 na Equação 5.2 (e observando a simetria dos sistemas 2 e 3), implica que  $\beta^{(1)} = \sqrt{3}$  e  $\beta^{(2)} = \beta^{(3)} = \frac{2}{\sqrt{3}}$ .

### 5.2.1.3 Superfície de escoamento

Em uma publicação anterior, Rice (1973) demonstrou que sólidos rígido-plásticos incompressíveis de *anisotropia arbitrária* que cumprem com o *princípio do máximo trabalho plástico*

(respeitam uma regra de fluxo associada) sob estado plano de deformações atendem a um critério de escoamento reduzido dependente apenas das tensões desviadoras  $(\sigma_{11} - \sigma_{22})/2$  e  $\sigma_{12}$ . Ou seja, são excluídas as tensões *fora do plano* e, conseqüentemente, a tensão média no plano  $\sigma = (\sigma_{11} + \sigma_{22})/2$ . Graficamente isto significa que o critério é equivalente a um *único* contorno convexo no plano de tensões de Mohr definido pelas tensões desviadoras.

Fundamentando-se nessa constatação, Rice (1973) construiu a superfície de escoamento para o modelo de cristais em EPD como o contorno poligonal no plano  $\left\{ \frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{2}, \sigma_{12} \right\}$  apresentado na Figura 25.

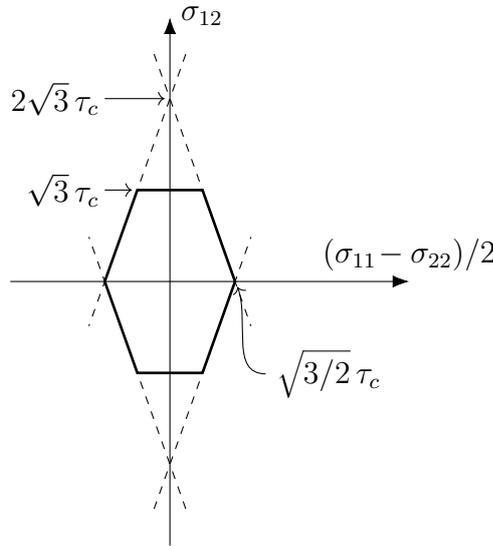


Figura 25 – Superfície de escoamento para um cristal CFC em EPD. Fonte: Rice (1987, p. 318).

Desenvolvendo a Equação 5.1 e observando que  $S_1^{(\alpha)} = M_2^{(\alpha)}$  e  $S_2^{(\alpha)} = -M_1^{(\alpha)}$ , fica

$$2 M_1^{(\alpha)} M_2^{(\alpha)} \frac{(\sigma_{11} - \sigma_{22})}{2} + (M_2^{(\alpha)} M_2^{(\alpha)} - M_1^{(\alpha)} M_1^{(\alpha)}) \sigma_{12} = \pm \beta^{(\alpha)} \tau_c, \quad (5.3)$$

na qual aplicando para o sistema  $\alpha$  o respectivo valor de  $\beta^{(\alpha)}$  obtém-se as retas da superfície poligonal da Figura 25.

#### 5.2.1.4 Condições em trincas estacionárias: equilíbrio de tensões e campos de tensões e deformações

Sejam  $r$  e  $\theta$  coordenadas polares centradas na ponta da trinca, então  $x_1 = r \cos \theta$  e  $x_2 = r \sin \theta$  conforme a Figura 26. O vetor unitário radial no plano  $\{x_1, x_2\}$  é  $e_i(\theta) = \frac{\partial r}{\partial x_i}$  (com  $(e_1, e_2) = (\cos \theta, \sin \theta)$ ) e  $e'_i := \frac{de_i}{d\theta}$  é o vetor unitário na direção do aumento de  $\theta$ . Então pode-se demonstrar que  $e'_i = r \frac{\partial \theta}{\partial x_i}$  e  $e'_i e_i = 0$ .

As equações de equilíbrio ficam

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} = \left( \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r} \right) e_i + \left( \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \theta} \right) \frac{e'_i}{r} = 0 . \quad (5.4)$$

Para um material perfeitamente plástico,  $r \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r} \rightarrow 0$  quando  $r \rightarrow 0$ ; assintoticamente à ponta da trinca a equação de equilíbrio implica

$$e'_i \sigma'_{ij} = 0 , \quad \text{com} \quad \sigma'_{ij} = \lim_{r \rightarrow 0} \left[ \frac{\partial \sigma_{ij}(r, \theta)}{\partial \theta} \right] = \sigma'_{ij}(\theta) .$$

A simetria de  $\sigma'_{ij}$  e  $e'_i e_i = 0$  implicam que  $\sigma'_{ij} \propto e_i e_j$ . É possível demonstrar que

$$\sigma'_{ij} = e_i e_j (\sigma'_{11} + \sigma'_{22}) . \quad (5.5)$$

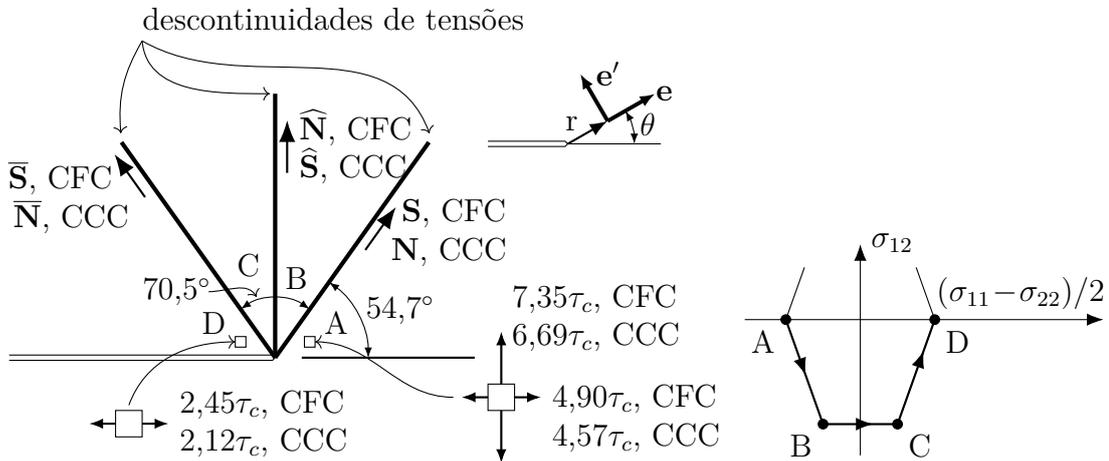


Figura 26 – Campo de tensões para trinca estacionária. Fonte: Rice (1987, p. 322).

Supondo que em algum setor circular particular com vértice na ponta da trinca o estado de tensões está sobre a superfície de escoamento, como vale a Equação 5.1 então  $M_i^{(\alpha)} \sigma'_{ij} S_j^{(\alpha)} = 0$  no interior do setor, e pela Equação 5.5

$$\left( M_i^{(\alpha)} e_i \right) \left( S_j^{(\alpha)} e_j \right) (\sigma'_{11} + \sigma'_{22}) = 0 . \quad (5.6)$$

A Equação 5.6 implica que para todo  $\theta$ , exceto *as quatro situações* nas quais  $\mathbf{e}$  é colinear a  $\mathbf{M}^{(\alpha)}$  ou  $\mathbf{S}^{(\alpha)}$ ,  $\sigma'_{11} + \sigma'_{22} = 0$ . Com isso, da Equação 5.5 implica que  $\sigma'_{ij} = 0$  e, então,  $\sigma_{ij}$  é constante internamente aos setores circulares. Para uma trinca sob tração,  $\sigma_{22} \neq 0$  em  $\theta = 0$ , então um campo com  $\sigma_{ij}$  constante para todo  $\theta$  em torno da ponta não pode satisfazer as condições de contorno na superfície da trinca. Logo, Rice (1987) concluiu que (i) as tensões em algum setor particular não estão sobre a superfície de escoamento, ou (ii) as tensões mudam descontinuamente em certos ângulos  $\theta$  (possivelmente aqueles nos quais  $\mathbf{e}$  é colinear a  $\mathbf{M}^{(\alpha)}$  ou  $\mathbf{S}^{(\alpha)}$ ). Em favor de uma alta triaxialidade, para a trinca

*estacionária* buscou soluções na forma de (ii). Estas soluções para o campo de tensões são demonstradas a seguir.

A solução do campo de tensões proposta para trinca estacionária consiste em fluxo plástico ocorrendo em todos os ângulos em torno da ponta da trinca porque, segundo o autor, considerações de análise limite indicam que este tipo de solução é o que proporciona maior triaxialidade.

Nas considerações a seguir,  $[[f]] = f(\theta^+) - f(\theta^-)$  é a diferença entre os limites laterais da função  $f(\theta)$ . Pretende-se verificar a existência de descontinuidades do tensor de tensões  $\sigma_{ij}$  na ponta da trinca, i.e., se para alguma direção radial  $\mathbf{e}$  tem-se  $[[\sigma_{ij}]]$  não nulo. A continuidade do vetor tensão implica em  $e'_\mu [[\sigma_{\mu\nu}]] = 0$ , e então

$$[[\sigma_{ij}]] = e_i e_j [[\sigma_{11} + \sigma_{22}]] \quad (5.7)$$

Como é procurada uma solução com escoamento em *todos* os ângulos em torno da ponta da trinca é necessário que as descontinuidades correspondam às retas entre dois pontos a tensões constantes sobre a superfície de escoamento. A correspondência entre uma linha de descontinuidade no espaço das tensões e um sistema de deslizamento  $\alpha$  implica que a contração  $M_i^{(\alpha)} \sigma_{ij} S_j^{(\alpha)} = 0$  é igual em ambos os lados da descontinuidade, logo

$$M_i^{(\alpha)} S_j^{(\alpha)} [[\sigma_{ij}]] = (M_i^{(\alpha)} e_i) (S_j^{(\alpha)} e_j) [[\sigma_{11} + \sigma_{22}]] = 0 \quad (5.8)$$

Então, uma descontinuidade é possível quando  $\mathbf{e}$  é colinear a  $\mathbf{M}^{(\alpha)}$  ou  $\mathbf{S}^{(\alpha)}$ . Assim, uma descontinuidade no campo de tensões correspondente a atividade plástica em uma certa família de sistemas de deslizamento deve existir ao longo do membro da família passando pela ponta da trinca *ou ao longo de uma linha perpendicular através da ponta*. Em uma descontinuidade o estado de tensões deve variar de vértice a vértice na superfície de escoamento, caso contrário uma nova descontinuidade somente seria possível após uma variação em  $90^\circ$ , o que impossibilitaria a construção da solução.

Através da Equação 5.7 é possível demonstrar que

$$[[\frac{1}{2}(\sigma_{11} + \sigma_{22})]] = -[[L]] , \quad [[L]]^2 = [[\sigma_{12}]]^2 + [[\frac{1}{2}(\sigma_{11} - \sigma_{22})]]^2 , \quad (5.9)$$

onde  $L$  é o comprimento de arco em torno da superfície de escoamento, crescendo na direção  $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$  na Figura 26. A primeira das Equações 5.9 pode ser reescrita na forma

$$\frac{1}{2} (\sigma_{11}(\theta^-) + \sigma_{22}(\theta^-)) = \frac{1}{2} (\sigma_{11}(\theta^+) + \sigma_{22}(\theta^+)) + [[L]] . \quad (5.10)$$

Para o setor D, a condição de contorno na ponta da trinca exige  $\sigma_{22}^D = 0$ . Assim, através da Equação 5.10 e da superfície de escoamento Rice (1987) construiu o campo de tensões da Figura 26.

É visto agora o campo de deformações. Fora das regiões descontínuas, o estado de tensões está em algum vértice da superfície de escoamento, ou seja, duas das três famílias de sistemas de deslizamento estão simultaneamente sob deformação plástica. Sejam duas famílias  $\alpha$  e  $\beta$  a taxa de deformação plástica é da forma

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \Lambda^{(\alpha)} \left( M_i^{(\alpha)} S_j^{(\alpha)} + M_j^{(\alpha)} S_i^{(\alpha)} \right) + \Lambda^{(\beta)} \left( M_i^{(\beta)} S_j^{(\beta)} + M_j^{(\beta)} S_i^{(\beta)} \right) , \quad (5.11)$$

com os coeficientes  $\Lambda$  os módulos do tensor de deformações. Em uma descontinuidade no campo de tensões, o par de sistemas  $(\alpha, \beta)$  sob deformação plástica muda para  $(\beta, \gamma)$ , e a direção em que isto ocorre é colinear a  $\mathbf{M}^{(\beta)}$  ou  $\mathbf{S}^{(\beta)}$ .

Logo a solução derivada por Rice (1987) não pressupõem somente corte na direção dos planos de deslizamento mas também ortogonal a estes (bandas de cisalhamento por dobra). Na Tabela 2 são apresentados os resultados de Rice para os valores das tensões normalizadas pelo tensão projetada crítica.

| Setor | $\sigma_{22}/\tau_c$ | $\sigma_{11}/\tau_c$ | $\sigma_{12}/\tau_c$ |
|-------|----------------------|----------------------|----------------------|
| A     | $3\sqrt{6}$ (7,35)   | $2\sqrt{6}$ (4,90)   | 0                    |
| B     | $2\sqrt{6}$ (4,90)   | $3\sqrt{6}/2$ (3,67) | $-\sqrt{3}$ (-1,73)  |
| C     | $\sqrt{6}$ (2,45)    | $3\sqrt{6}/2$ (3,67) | $-\sqrt{3}$ (-1,73)  |
| D     | 0                    | $\sqrt{6}$ (2,45)    | 0                    |

Tabela 2 – Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Figura 26. Fonte: Rice (1987, p. 322).

### 5.2.2 Contribuição de Drugan (2001) ao modelo de Rice (1987)

Baseando-se na constatação de que bandas de cisalhamento por dobra não são evidenciadas em diversos experimentos e simulações numéricas de deformação plástica na ponta de trinca em monocristais, Drugan (2001) procurou soluções para o modelo de Rice (1987) desconsiderando a possibilidade de corte ortogonal aos planos de deslizamento.

Para garantir a elevada triaxialidade na construção dos campos, Drugan (2001) baseou-se nos experimentos de Crone e Shield (2001) e simulações em discordâncias discretas de Van der Giessen et al. (2001). Os resultados de ambos autores concordam com os resultados de Rice (1987) para  $0 < \theta < 90^\circ$  e que o estado de tensões da região B de Rice (1987) (Figura 26) persiste além de  $\theta = 90^\circ$ . Também ambos não apresentam a evidência de presença do estado C, nem deformação plástica concentrada no raio de  $\theta = 90^\circ$ . Também sugerem a existência de um setor elástico entre as Regiões B e D.

Assim, para concordar com estes resultados, é necessário também um conjunto de equações que descreva setores com *comportamento elástico* em torno da ponta da trinca. Em material

com resposta elástica isotrópica, a equação de compatibilidade de tensões no plano é

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) (\sigma_{11} + \sigma_{22}) = 0 \quad (5.12)$$

A Equação 5.12 é aplicável tanto a setores abaixo do escoamento quanto a setores cujo campo de deformações plásticas seja independente ou varie linearmente com a posição. Multiplicando a Equação 5.12 por  $r^2$ , tomando o limite  $r \rightarrow 0$  chega-se a

$$(\sigma_{11} + \sigma_{22})'' = 0 \Rightarrow \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2\tau_c} = C_1 + 2C_2\theta \quad (5.13)$$

e, com as Equações 5.5, 5.12 e 5.13 o campo de tensões em um setor elástico próximo a ponta da trinca é descrito pelas equações

$$\frac{\sigma_{11} - \sigma_{22}}{2\tau_c} = C_2 \sin 2\theta + C_4 \quad (5.14)$$

$$\frac{\sigma_{11} + \sigma_{22}}{2\tau_c} = C_1 + 2C_2\theta \quad (5.15)$$

$$\frac{\sigma_{12}}{\tau_c} = -C_2 \cos 2\theta + C_3 \quad (5.16)$$

onde  $C_1$  a  $C_4$  são constantes a serem determinadas.

Com as Equações 5.14 a 5.16 para garantir a continuidade das tensões nos setores elásticos e aplicando as condições de contorno na trinca, Drugan (2001) demonstra três possíveis configurações de campos na ponta da trinca, resultando em diferentes valores para os ângulos  $\theta_2$  e  $\theta_3$ , apresentados nas Tabelas 3, 4 e 5 referentes a Figura 27.

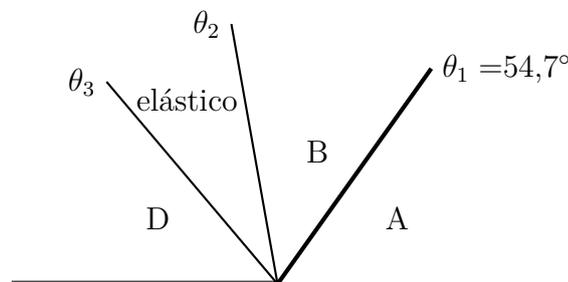


Figura 27 – Forma do campo de tensões na ponta da trinca de um monocristal CFC com impedimento ao cisalhamento por dobra. Fonte: Drugan (2001, p. 2165).

| Setor | $\sigma_{22}/\tau_c$ | $\sigma_{11}/\tau_c$ | $\sigma_{12}/\tau_c$ |
|-------|----------------------|----------------------|----------------------|
| A     | 6,90598              | 4,45949              | 0                    |
| B     | 4,45949              | 3,23475              | -1,73205             |
| D     | 0                    | 2,44949              | 0                    |

Tabela 3 – Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Figura 27 com  $\theta_2 = 98.0495^\circ$  e  $\theta_3 = 125.264^\circ$ . Fonte: Drugan (2001, p. 2166).

| Setor | $\sigma_{22}/\tau_c$ | $\sigma_{11}/\tau_c$ | $\sigma_{12}/\tau_c$ |
|-------|----------------------|----------------------|----------------------|
| A     | 6,81148              | 4,36199              | 0                    |
| B     | 4,36199              | 3,13725              | -1,73205             |
| D     | 0                    | 2,44949              | 0                    |

Tabela 4 – Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Figura 27 com  $\theta_2 = \theta_3 = 111.675^\circ$ . Fonte: Drugan (2001, p. 2167).

| Setor | $\sigma_{22}/\tau_c$ | $\sigma_{11}/\tau_c$ | $\sigma_{12}/\tau_c$ |
|-------|----------------------|----------------------|----------------------|
| A     | 7,03106              | 4,58157              | 0                    |
| B     | 4,58157              | 3,35683              | -1,73205             |
| D     | 0                    | 2,44949              | 0                    |

Tabela 5 – Campos de tensões em setores plastificados correspondendo à Figura 27 com  $\theta_2 = 90^\circ$ ,  $\theta_3 = 125.264^\circ$  e um salto de tensão através da descontinuidade  $\theta_3 = 125.264^\circ$ . Fonte: Drugan (2001, p. 2168).

## 6 MODELO PARA ESTADO PLANO DE DEFORMAÇÕES

### 6.1 RELAÇÃO CONSTITUTIVA CRISTALINA

Para a redução da teoria geral de Asaro (1983) apresentada no Capítulo 4 ao caso simplificado de estado plano de deformações de Rice (1987) exposto no Capítulo 5 é necessário estabelecer as seguintes condições:

- As componentes do gradiente dos deslocamentos são pequenas, i.e.  $\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{ij} \approx 0$ . Implica que  $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \approx \mathbf{I}$ ;
- A rotação da rede cristalina relativamente ao material é pequena;
- O cristal é quase-isotrópico e linear em relação as propriedades elásticas;
- O material tem pouca compressibilidade.

Estas condições implicam: pelo Item a)  $\dot{\mathbf{E}} \approx \mathbf{I} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{D}$  (e definindo  $\dot{\mathbf{E}}^* \approx \mathbf{D}^*$  e  $\dot{\mathbf{E}}^p \approx \mathbf{D}^p$ ,  $\dot{\mathbf{E}} = \dot{\mathbf{E}}^* + \dot{\mathbf{E}}^p$ )<sup>1</sup>; pelo Item b)  $\beta^{(\alpha)} = 0$ ; pelo Item c) o tensor de elasticidade  $\mathbf{C}$  é aproximadamente o tensor isotrópico de Hooke; e pelo Item d)  $\boldsymbol{\tau} \approx \boldsymbol{\sigma}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  o tensor de tensões de Cauchy. Tal situação equivale à abordagem em *pequenas deformações*, onde as configurações de *referência* e *atual* e as descrições cinemáticas *Lagrangeana* e *Euleriana* se confundem.

O fluxo de deformação plástica é relacionado com os deslizamentos nos sistemas cristalográficos *ativos*  $\alpha$  por

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = (\dot{\mathbf{E}}^p)_{ij} = \sum_{(\alpha)} P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad \text{com } P_{ij}^{(\alpha)} = (\mathbf{P}^{(\alpha)})_{ij} = \frac{1}{2} (m_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} + m_j^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)}) \quad (6.1)$$

onde  $\gamma^{(\alpha)}$  representa o deslizamento plástico no sistema  $\alpha$  e  $P_{ij}^{(\alpha)}$  a componente  $ij$  do tensor de orientação de Schmid para o sistema  $\alpha$ . Na Equação 6.1  $m_i^{(\alpha)}$  e  $s_i^{(\alpha)}$  representam as componentes dos vetores  $\mathbf{m}^{(\alpha)}$  e  $\mathbf{s}^{(\alpha)}$  respectivamente.

Nestas condições a Equação 4.14 assume a forma

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : \dot{\mathbf{E}} - \sum_{\beta=1}^n \mathbf{C} : \mathbf{P}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)},$$

ou na forma indicial

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} - \sum_{\beta=1}^n C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)}. \quad (6.2)$$

<sup>1</sup> Pois sabe-se que  $\dot{\mathbf{E}} \approx (\mathbf{F})^T \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{F}$  (e.g. Khan e Huang (1995, p. 40)).

Contraindo a Equação 6.2 com  $P_{ij}^{(\alpha)}$  e lembrando que a tensão projetada no sistema  $\alpha$  é  $\dot{\tau}^{(\alpha)} = P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\sigma}_{ij}$  fica

$$P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} - \sum_{\beta=1}^n P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} = \dot{\tau}^{(\alpha)}. \quad (6.3)$$

Neste trabalho, assume-se que o comportamento do material é independente da taxa de deformações. Admite-se que o endurecimento cristalino dependa dos deslizamentos através do tensor de endurecimento  $h_{\alpha\beta}$  através da relação  $\dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}$ .

## 6.2 SOLUÇÃO DO PROBLEMA ELASTOPLÁSTICO

Aplicando o método de Euler implícito a Equação 6.3 pode ser aproximada por

$$P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} \Delta\epsilon_{kl} - \sum_{\beta=1}^n P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \Delta\gamma^{(\beta)} = \Delta\tau^{(\alpha)}. \quad (6.4)$$

Para a solução do problema plástico descrito pela Equação 6.4 adota-se a abordagem incremental *preditor-corretor*, descrita a seguir.

Em cada incremento de deformação  $\Delta\epsilon_{kl}$  calcula-se o incremento de tensões através da relação  $\Delta\sigma_{ij}^E = C_{ijkl} \Delta\epsilon_{kl}$  (preditor elástico). O estado de tensões do preditor elástico  $\sigma_{ij}^E$  é então atualizado a partir do estado de tensões inicial  $\sigma_{ij}^0$  por  $\sigma_{ij}^E = \sigma_{ij}^0 + \Delta\sigma_{ij}^E$ . Verifica-se então se houve plastificação e, caso ocorra, corrige-se o estado de tensões em termos da deformação plástica.

A verificação e correção são realizadas pelas etapas:

- a) Primeiramente calcula-se a tensão projetada do preditor elástico  $\tau^{(\alpha),E} = P_{ij}^{(\alpha)} \sigma_{ij}^E$ ;
- b) Verifica-se a condição de escoamento  $f = |\tau^{(\alpha),E}| - |\tau_c^{(\alpha),0}|$ . Se  $f < 0$  então o sistema  $\alpha$  é não-crítico e  $\Delta\gamma^{(\alpha)} = 0$ . Se  $f \geq 0$ ,  $\alpha$  é crítico;
- c) Para os sistemas críticos  $\Delta\tau^{(\alpha),E} = |f| = \left| |\tau^{(\alpha),E}| - |\tau_c^{(\alpha),0}| \right|$ ;
- d) Os deslizamentos  $\Delta\gamma^{(\beta)}$  nos sistemas críticos necessários ao cumprimento da equação constitutiva são obtidos pela Equação 6.4 fazendo  $P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} \Delta\epsilon_{kl} = \Delta\tau^{(\alpha),E}$ <sup>2</sup> e  $\Delta\tau^{(\alpha)} = \text{sgn}(\Delta\tau^{(\alpha),E}) \underbrace{\Delta\tau_c^{(\alpha)3}}_{\geq 0}$ , a fim de que o nível de tensões mantenha-se sobre a superfície de plastificação;

<sup>2</sup> Logo utiliza-se na Equação 6.4 somente a parcela da tensão projetada “desequilibrada” do problema elastoplástico.

<sup>3</sup> Porque a diminuição de  $\Delta\tau^{(\alpha),E}$  até  $\Delta\tau^{(\alpha)}$  não pode ultrapassar o zero.

- e) A variação da tensão projetada crítica é calculada pela expressão  $\Delta\tau_c^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)} h_{\alpha\beta} |\Delta\gamma^{(\beta)}| \geq 0$ , onde  $|\Delta\gamma^{(\beta)}| = \text{sgn}(\Delta\gamma^{(\beta)}) \Delta\gamma^{(\beta)} = \begin{cases} \Delta\gamma^{(\beta)}, & \text{se } \Delta\gamma^{(\beta)} > 0 \\ -\Delta\gamma^{(\beta)}, & \text{se } \Delta\gamma^{(\beta)} < 0 \end{cases}$  ;
- f) A tensão projetada crítica é atualizada pela relação  $|\tau_c^{(\alpha),1}| = |\tau_c^{(\alpha),0}| + |\Delta\tau_c^{(\alpha)}|$ , gerando uma nova superfície de plastificação.

Então, a equação constitutiva atualizada fica:

$$\Delta\tau^{(\alpha),E} - \sum_{\beta=1}^n P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \Delta\gamma^{(\beta)} = \text{sgn}(\Delta\tau^{(\alpha),E}) \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \text{sgn}(\Delta\gamma^{(\beta)}) \Delta\gamma^{(\beta)}, \quad (6.5)$$

i.e.,

$$\Delta\tau^{(\alpha),E} = \sum_{\beta=1}^n \underbrace{\left[ P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} + h_{\alpha\beta} \text{sgn}(\Delta\tau^{(\alpha),E}) \text{sgn}(\Delta\gamma^{(\beta)}) \right]}_{N_{\alpha\beta}} \Delta\gamma^{(\beta)}. \quad (6.6)$$

O tensor  $N_{\alpha\beta} = P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} + h_{\alpha\beta} \text{sgn}(\Delta\tau^{(\alpha),E}) \text{sgn}(\Delta\gamma^{(\beta)})$  é o tensor constitutivo cristalino, e relaciona tensões e deformações em nível de microestrutura do cristal.

Em notação matricial a equação Equação 6.5 fica

$$\mathbb{N}\mathbb{G} = \mathbb{T}, \quad (6.7)$$

com  $\mathbb{G}$  o vetor dos  $\Delta\gamma^{(\beta)}$ ,  $\mathbb{T}$  o vetor dos  $\Delta\tau^{(\alpha),E}$  e  $\mathbb{N}$  a matriz dos  $N_{\alpha\beta}$ . Dessa forma, a solução do problema depende da invertibilidade da matriz  $\mathbb{N}$  para a obtenção de  $\mathbb{G}$ .

Porém,  $\text{sgn}(\Delta\tau^{(\alpha),E})$  é conhecido antes da solução do sistema, mas  $\text{sgn}(\Delta\gamma^{(\beta)})$  não. Isto é contornado através de um procedimento iterativo, resolvendo o sistema primeiramente sem o endurecimento, e após, corrigindo a solução considerando o endurecimento.

Na seção 4.5 foi observado que as análises experimentais indicam que os elementos diagonais e não-diagonais do tensor  $h_{\alpha\beta}$  têm a mesma ordem. Como consequência a matriz constitutiva cristalina  $\mathbb{N}$  tem os termos não diagonais da ordem dos diagonais. Isto pode levar ao mal condicionamento ou singularidade do sistema da Equação 6.7, já que não é garantida a diagonal-dominância da matriz constitutiva. Em análises numéricas deve-se garantir que os valores de endurecimento empregados estejam dentro da faixa dos valores que não ocasionam instabilidades no cálculo computacional.

Um importante ponto a destacar é sobre quantos sistemas críticos para o cristal de Rice podem ocorrer em cada incremento de deformação. Teoricamente, i.e., para incrementos infinitesimais de deformação (respectivamente incrementos infinitesimais de tensão), a [Equação 5.3](#) e a [superfície de plastificação correspondente \(Figura 25\)](#) mostram que o [Implementação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal](#)

conjunto de sistemas críticos de Rice pode conter no máximo dois sistemas, quando o estado de tensões atinge um dos vértices da superfície de escoamento, e um sistema quando o estado de tensões está sobre as arestas da superfície.

Situação diferente acontece na abordagem preditor-corretor descrita nesta seção. Nesta abordagem admite-se o comportamento elástico até que o estado de tensões ultrapasse a superfície de escoamento. Se o incremento de tensões, porém, for muito alto, o estado de tensões pode atingir zonas com os três sistemas efetivos de Rice críticos, fora das bandas elásticas definidas pelos sistemas efetivos, conforme a Figura 28.

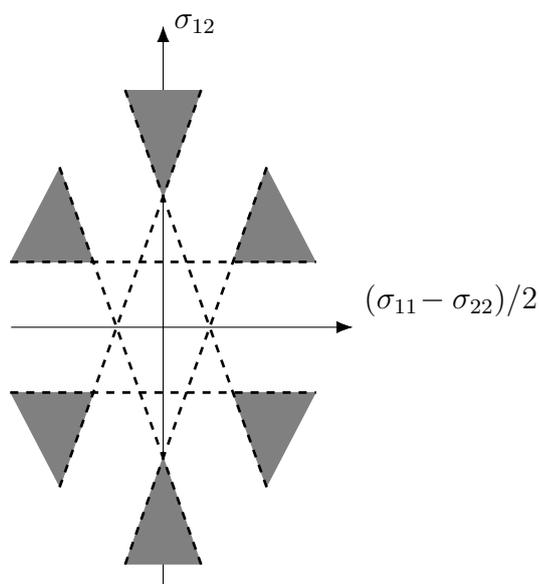


Figura 28 – Bandas elásticas dos sistemas de deslizamento efetivos (em branco, delimitadas por linha tracejada) e regiões fora das bandas (em cinza).

Portanto, quanto menor for o incremento de tensão, ou seja, quanto menor for o incremento de deformações, mais próxima a solução do método preditor-corretor estará do esperado para o modelo de Rice (1987). É de imediato então que para incrementos de deformações suficientemente elevados a solução preditor-corretor *pode distanciar-se muito* da solução de Rice, já que o conjunto de sistemas ativos em cada incremento não necessariamente é igual ao admitido pelo modelo analítico.

Para até dois sistemas ativos é fácil perceber que a matriz  $\mathbb{N}$  é diagonal dominante, portanto é invertível. Porém, pela possibilidade de ocorrência de três sistemas críticos em um intervalo de deformação, na seção 6.4 são discutidos a invertibilidade e bom condicionamento de  $\mathbb{N}$  através da avaliação de seu determinante e número de condicionamento para alguns valores de parâmetros do material utilizados na literatura.<sup>4</sup>

<sup>4</sup> De fato, nas aplicações com deformações uniformes feitas neste trabalho (veja Capítulo 7), procurou-se aplicar incrementos pequenos de deformações, ativando sempre somente dois sistemas. Mas pela

Na próxima seção é apresentada a demonstração da independência de  $\mathbb{N}$  com a orientação cristalina do material. Este resultado pode parecer imediato mas sua garantia é importante na modelagem de materiais com orientações cristalinas variadas. Outra justificativa da demonstração é que ela apresenta as componentes da matriz  $\mathbb{N}$  simplificadas ao caso do cristal de Rice.

### 6.3 INFLUÊNCIA DA ORIENTAÇÃO DOS SISTEMAS EFETIVOS NO CRISTAL DE RICE

Os sistemas de deslizamento efetivos para o cristal de Rice são numerados de acordo com a Figura 29.

São introduzidos os vetores de direção dos *planos efetivos* e das *direções efetivas* para um sistema  $\beta$ , respectivamente  $\mathbf{M}^{(\beta)}$  e  $\mathbf{S}^{(\beta)}$ , como

$$\mathbf{M}^{(\beta)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_\beta + \pi/2) \\ \sin(\theta_\beta + \pi/2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^{(\beta)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_\beta) \\ \sin(\theta_\beta) \end{pmatrix}$$

$\theta_\beta$  é o ângulo de orientação do sistema efetivo em relação ao sentido positivo do eixo  $x_1$ . O tensor de Schmid para cristal efetivo fica

$$P_{ij}^{(\beta)} = \frac{1}{2} (M_i^{(\beta)} S_j^{(\beta)} + M_j^{(\beta)} S_i^{(\beta)})$$

com  $i, j$  assumindo valores 1 e 2.

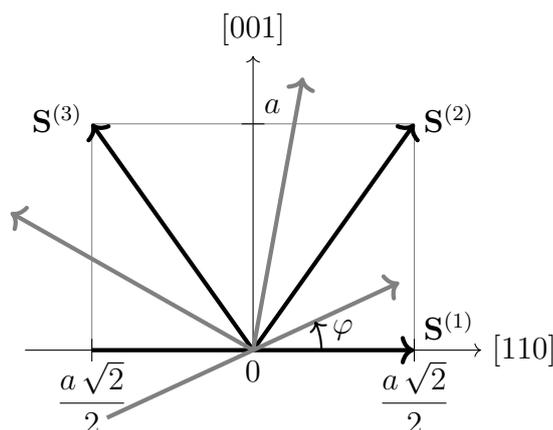


Figura 29 – Orientação dos sistemas efetivos e sentido da rotação arbitrária  $\varphi$ .

As componentes de  $P_{ij}^{(\beta)}$  são

$$P_{11}^{(\beta)} = \cos(\theta_\beta + \pi/2) \cos(\theta_\beta) = -\sin(\theta_\beta) \cos(\theta_\beta)$$

possibilidade do modelo comportar deslizamento dos três sistemas e a aplicação à estudo da trinca, a seção 6.4 está justificada.

Implementação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal

$$P_{22}^{(\beta)} = \sin(\theta_\beta + \pi/2) \sin(\theta_\beta) = \sin(\theta_\beta) \cos(\theta_\beta)$$

$$P_{12}^{(\beta)} = \frac{1}{2} (\cos(\theta_\beta + \pi/2) \sin(\theta_\beta) + \sin(\theta_\beta + \pi/2) \cos(\theta_\beta)) = \cos^2(\theta_\beta) - \frac{1}{2}$$

Logo, têm-se as seguintes relações

$$P_{11}^{(\beta)} P_{11}^{(\beta)} = P_{22}^{(\beta)} P_{22}^{(\beta)} = -P_{11}^{(\beta)} P_{22}^{(\beta)} = \sin(\theta_\alpha) \sin(\theta_\beta) \cos(\theta_\alpha) \cos(\theta_\beta)$$

$$P_{12}^{(\beta)} P_{12}^{(\beta)} = \cos^2(\theta_\alpha) \cos^2(\theta_\beta) - \frac{1}{2} (\cos^2(\theta_\alpha) + \cos^2(\theta_\beta)) + \frac{1}{4}$$

$$P_{11}^{(\beta)} P_{11}^{(\beta)} + P_{12}^{(\beta)} P_{12}^{(\beta)} = \frac{1}{4} \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta)$$

### 6.3.1 Relação constitutiva para o conjunto de sistemas efetivos

O tensor de elasticidade para um material elástico-linear isotrópico é

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (6.8)$$

e  $\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$  e  $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} = G$  são os parâmetros de Lamé;  $E$  é o módulo de elasticidade transversal,  $\nu$  a razão de Poisson e  $G$  o módulo de cisalhamento.

Para o caso do *crystal efetivo* de Rice, a contração  $P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)}$ <sup>5</sup> fica

$$P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} = P_{11}^{(\alpha)} C_{1111} P_{11}^{(\beta)} + P_{22}^{(\alpha)} C_{2222} P_{22}^{(\beta)}$$

$$+ 2 P_{11}^{(\alpha)} C_{1122} P_{22}^{(\beta)} + 4 P_{12}^{(\alpha)} C_{1212} P_{12}^{(\beta)}$$

$$= (\lambda + 2\mu) (P_{11}^{(\alpha)} P_{11}^{(\beta)} + P_{22}^{(\alpha)} P_{22}^{(\beta)})$$

$$+ 2\lambda P_{11}^{(\alpha)} P_{22}^{(\beta)} + 4\mu P_{12}^{(\alpha)} P_{12}^{(\beta)}$$

$$= 4\mu (P_{11}^{(\alpha)} P_{11}^{(\beta)} + P_{12}^{(\alpha)} P_{12}^{(\beta)})$$

$$= \mu \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta)$$

Então, a relação constitutiva para o cristal efetivo de Rice é

$$N_{\alpha\beta} = \mu \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta) + h_{\alpha\beta} \operatorname{sgn}(\Delta\tau^{(\alpha),E}) \operatorname{sgn}(\Delta\gamma^{(\beta)})$$

e, particularizando para endurecimento de Hutchinson-Asaro:

$$N_{\alpha\beta} = \mu \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta) + \left( q H(\gamma) + (1-q) H(\gamma) \delta_{\alpha\beta} \right) \operatorname{sgn}(\Delta\tau^{(\alpha),E}) \operatorname{sgn}(\Delta\gamma^{(\beta)})$$

<sup>5</sup> Índices tomando os valores 1 e 2.

É fácil notar que uma rotação do conjunto de sistemas de deslizamento não altera os valores das componentes do tensor constitutivo. De fato, dada uma rotação  $\varphi$  no conjunto, para qualquer dupla de sistemas  $(\alpha, \beta)$

$$\cos(2(\theta_\alpha + \varphi) - 2(\theta_\beta + \varphi)) = \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta), \quad (6.9)$$

o que prova a afirmação anterior.

## 6.4 INVERTIBILIDADE E CONDICIONAMENTO DA MATRIZ CONSTITUTIVA

A independência da relação constitutiva com o ângulo de orientação dos sistemas efetivos de Rice implica na independência do condicionamento do sistema de Equação 6.7 com a orientação. Porém o endurecimento latente presente na relação constitutiva e a variação do endurecimento com a deformação pode implicar na predominância dos termos não diagonais da matriz associada, o que pode piorar o condicionamento do sistema de equações. É salientado que para o endurecimento de Taylor (apresentado na subseção 4.5.1) a equação constitutiva é sempre solúvel e bem condicionada para parâmetros do material fisicamente coerentes.

A dependência do determinante e número de condicionamento<sup>6</sup> do sistema da Equação 6.7 com a variação de  $q$  e de  $\gamma$  para as diferentes relações de endurecimento é apresentada nas Figuras 30 e 31. Os parâmetros utilizados são descritos na Tabela 6, que representam uma liga de cobre-alumínio. Os parâmetros do material adotados na literatura em geral são relacionados com  $\tau_0$ . A mesma prática foi adotada neste trabalho, com as relações e o valor de  $\tau_0 = 60,84$  MPa adotados por Peirce, Asaro e Needleman (1982). Tensões críticas nesta faixa normalmente são as utilizadas em análises numéricas (ver Columbus e Gruzicic (2002)).

Tabela 6 – Parâmetros do material (cristal de uma liga de cobre-alumínio).

|          |               |             |
|----------|---------------|-------------|
| $\tau_0$ |               | 60,84 MPa   |
| $E$      | $1000 \tau_0$ | 60840 MPa   |
| $\nu$    |               | 0,3         |
| $H_0$    | $8,9 \tau_0$  | 541,476 MPa |
| $\tau_s$ | $1,8 \tau_0$  | 109,512 MPa |
| $n$      |               | 0,1         |

<sup>6</sup> Seja  $\mathbb{M}$  uma matriz quadrada. Define-se o raio espectral de  $\mathbb{M}$ ,  $\rho(\mathbb{M})$  como o maior dos autovalores  $\lambda$  de  $\rho(\mathbb{M})$ , i.e.  $\rho = \max |\lambda|$ . Define-se também a norma euclidiana de  $\rho(\mathbb{M})$ ,  $|\mathbb{M}|_2 = \sqrt{\rho(\mathbb{M}^T \mathbb{M})}$ . O número de condicionamento de  $\mathbb{M}$  segundo a norma euclidiana é definido como  $\text{cond}_2(\mathbb{M}) = |\mathbb{M}|_2 |\mathbb{M}^{-1}|_2$ . O número de condicionamento de uma matriz associada a um sistema de equações algébricas lineares indica a amplitude de variabilidade do erro relativo da solução em relação ao erro relativo de perturbação no sistema (BURDEN; FAIRES, 2010, p. 7). Como regra empírica, se  $\text{cond}_2(\mathbb{M}) = \mathcal{O}(10^p)$  então está se perdendo em torno de  $p$  dígitos de precisão na solução do sistema linear.

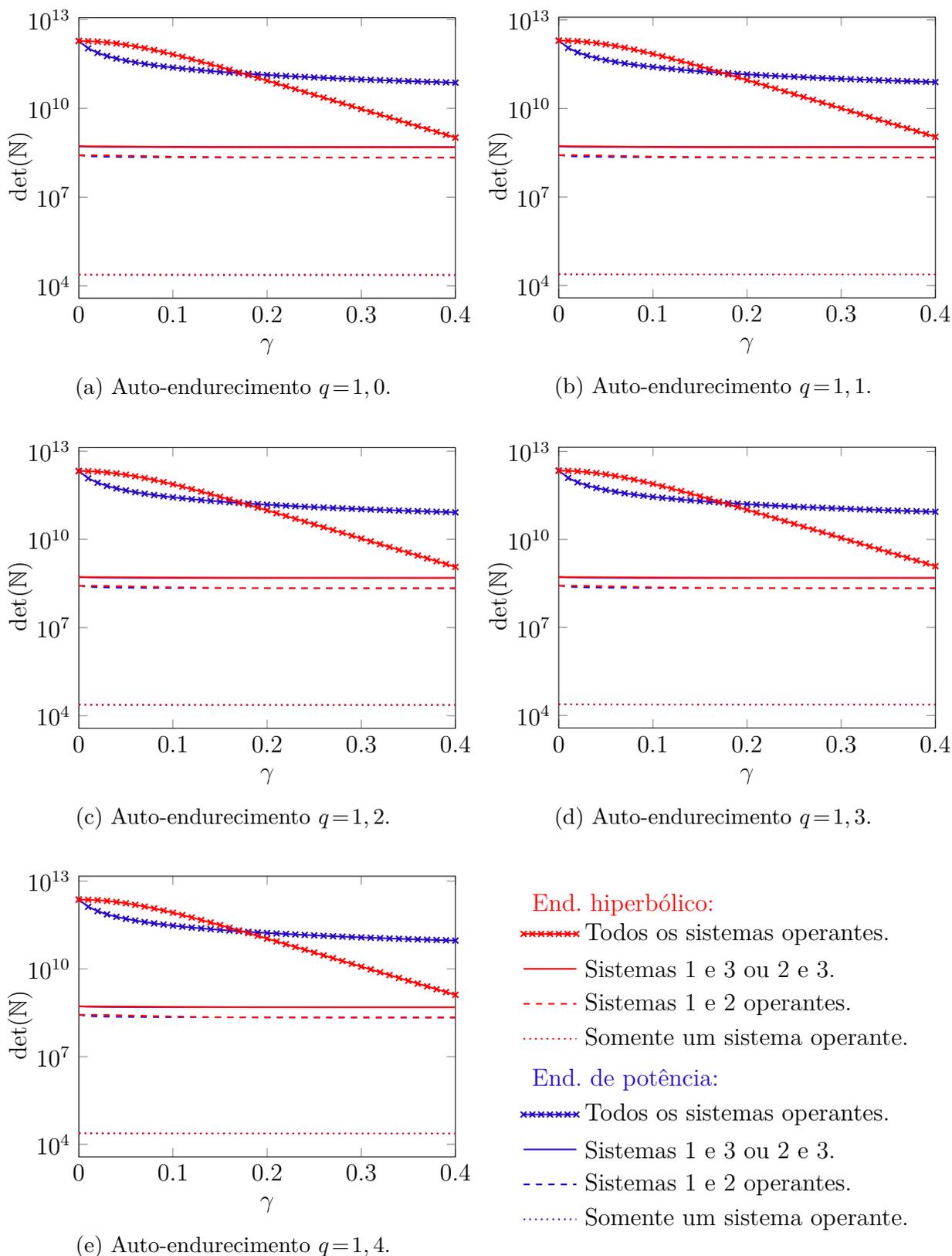


Figura 30 – Variação do determinante da matriz constitutiva  $\mathbb{N}$  em função de  $\gamma$  para diferentes coeficientes de auto-endurecimento e variações hiperbólica e de potência. O determinante é avaliado para todas as combinações de sistemas operantes.

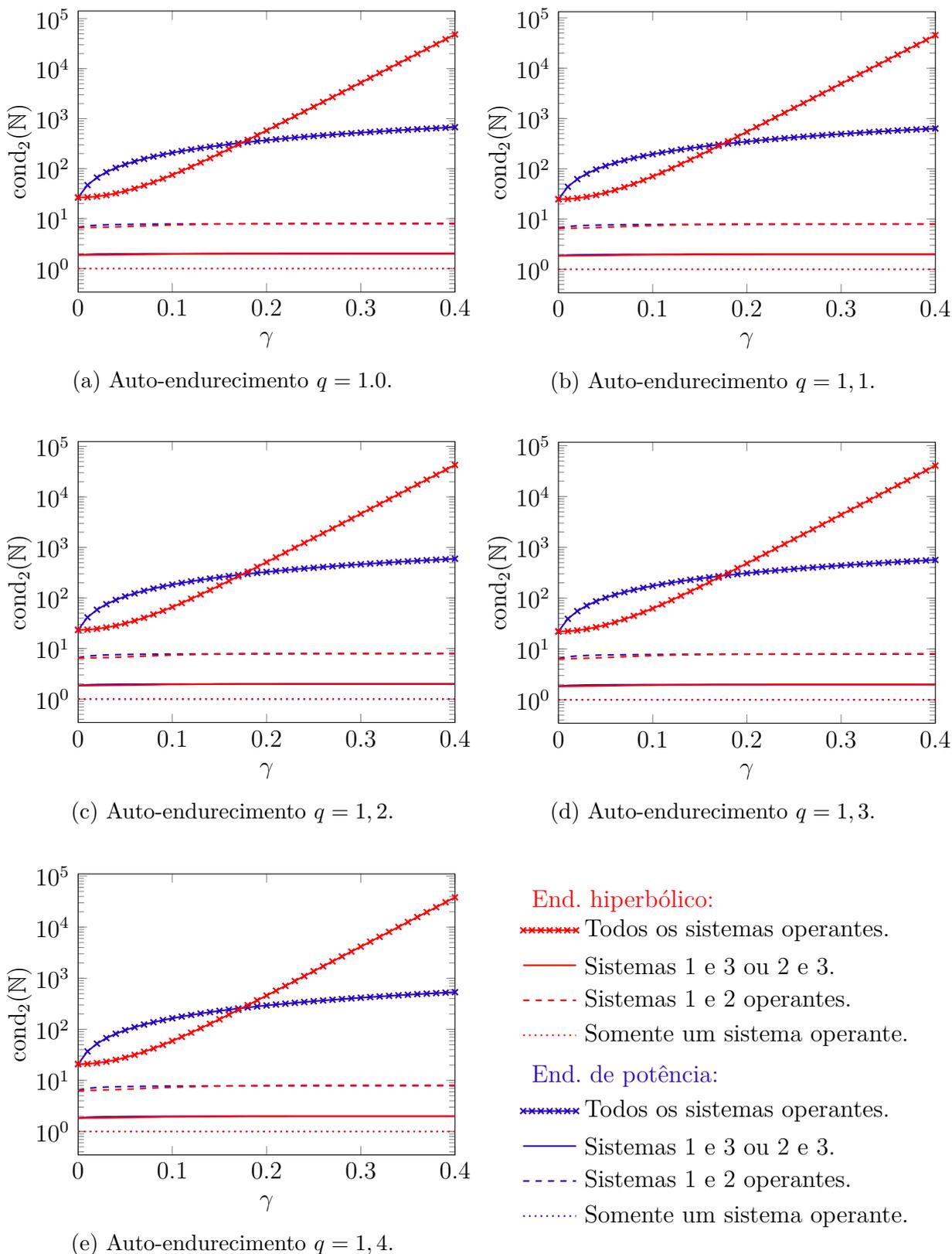


Figura 31 – Variação do número de condicionamento da matriz constitutiva  $\mathbb{N}$  segundo a norma euclidiana em função de  $\gamma$  para diferentes coeficientes de auto-endurecimento e variações hiperbólica e de potência. O condicionamento é avaliado para todas as combinações de sistemas operantes.

Os resultados apresentados nos gráficos das Figuras 30 e 31 mostram que na faixa de valores considerados a influência do parâmetro  $q$  no determinante e condicionamento do sistemas para qualquer condição de operação dos sistemas efetivos é baixa. Também, para qualquer caso o sistema de equações é solúvel pois o determinante da matriz constitutiva é estritamente positivo.

Em relação ao condicionamento, vê-se que para grandes deslizamentos o endurecimento hiperbólico leva a números de condicionamento bem maiores que o endurecimento em potência. Esta diferença se deve ao decréscimo assintótico a zero da relação hiperbólica, o que não ocorre na relação de potência. O número de condicionamento mais alto para a relação hiperbólica é da ordem de  $10^5$ . Isto significa que para uma aritmética de ponto flutuante de  $n$  casas decimais a precisão é da ordem de  $n - 5$  casas decimais. Deve-se ter em mente esta possível imprecisão nos resultados em simulações utilizando este modelo. Trabalhando-se com precisão dupla têm-se 9 casas decimais de precisão para este caso.

## 7 MODELO NUMÉRICO

Neste capítulo são tratados aspectos da discretização numérica do modelo de equações do Capítulo 6 pelo método dos elementos finitos e a validação do modelo numérico. Para a validação primeiramente são propostos modelos de mono-elementos sob deformações uniformes para a verificação do cumprimento da equação constitutiva cristalina. A trajetória do estado de tensões no espaço das tensões desviadoras é verificada, tanto para cristal elastoplástico perfeito, quanto para os casos com endurecimento. Após, o modelo numérico é validado através de um modelo de trinca sob tração em monocristal CFC e comparação dos campos próximos à ponta da trinca com os resultados analíticos do problema aproximados por Rice (1987) e Drugan (2001).

### 7.1 DISCRETIZAÇÃO EM ELEMENTOS FINITOS

Sejam  $V$  o domínio e  $S$  a fronteira do problema elastoplástico. Segundo princípio dos trabalhos virtuais temos

$$\int_V \sigma_{ij} \delta u_{i,j} dV = \int_S T_i \delta u_i dS,$$

onde  $u_i$  e  $T_i$  são a componente  $i$  dos campos de deslocamentos e vetores tensão externos respectivamente. Aplicando a interpolação para  $u_i(x, y)$  da forma  $u_i = \sum_n \Phi^n U_i^n$ , em que  $\Phi^n$  são as funções de interpolação e  $U_i^n$  deslocamentos nodais, o problema torna-se

$$F_i^{n,int} = \int_V \sigma_{ij} \Phi_{,j}^n dV = \int_S T_i \Phi^n dS = F_i^{n,ext}, \quad (7.1)$$

em que  $F_i^{n,int}$  denota forças internas e  $F_i^{n,ext}$  forças externas, que é a condição de equilíbrio.

A solução do problema não linear é feita pelo método de Newton-Raphson. Sejam  $\mathbb{F}^{int}$  o vetor de forças internas,  $\mathbb{F}^{ext}$  o vetor de forças externas,  $\mathbb{R}$  o vetor de resíduo (forças desequilibradas) e  $\mathbb{U}$  o vetor de deslocamentos. Então

$$\mathbb{F}^{int} - \mathbb{F}^{ext} = \mathbb{R}.$$

A expansão de  $\mathbb{R}$  em termos de  $\mathbb{U}$

$$\left( \frac{d\mathbb{R}^T}{d\mathbb{U}} \right) \Big|_{N-1} \Delta\mathbb{U}|_N = -\mathbb{R}|_{N-1},$$

em que  $|_N$  denota avaliação na iteração  $N$  e  $\frac{d\mathbb{R}^T}{d\mathbb{U}}$  é a matriz de rigidez tangente  $\mathbb{K}_t$ .

$$\mathbb{K}_t = \frac{d\mathbb{R}^T}{d\mathbb{U}} = \frac{d\mathbb{F}^{int T}}{d\mathbb{U}} - \frac{d\mathbb{F}^{ext T}}{d\mathbb{U}} = \frac{d\mathbb{F}^{int T}}{d\mathbb{U}},$$

pois  $\frac{d\mathbb{F}^{\text{extT}}}{d\mathbb{U}} = 0$  para forças conservativas.

Utilizando a Equação 7.1 e denotando por  $\mathbb{B}$  a matriz dos  $\Phi_{,j}^n$ ,

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_t &= \frac{d\mathbb{F}^{\text{intT}}}{d\mathbb{U}} = \frac{1}{d\mathbb{U}} \int_V [d\sigma_{ij}]^T \mathbb{B} dV = \frac{1}{d\mathbb{U}} \int_V [d\epsilon_{kl}]^T \mathbb{C} \mathbb{B} dV \\ &= \frac{d\mathbb{U}^T}{d\mathbb{U}} \int_V \mathbb{B}^T \mathbb{C} \mathbb{B} dV = \int_V \mathbb{B}^T \mathbb{C} \mathbb{B} dV, \end{aligned}$$

no qual  $\mathbb{C}$  é a matriz constitutiva elastoplástica.

Devido a natureza multiescala da teoria, com sistema de equações resolvido na “microestrutura”, e critério de escoamento em termos de valores absolutos, a obtenção explícita da matriz  $\mathbb{C}$  é dificultada. Dessa forma, a matriz de rigidez tangente é avaliada numericamente através de perturbações nas coordenadas nodais a cada passo de tempo<sup>1</sup>.

## 7.2 MONO-ELEMENTOS

São propostos mono-elementos quadriláteros de dimensões 1 por 1 sob tração uniforme (Figura 32a) e cisalhamento puro (Figura 32b). Os parâmetros do material utilizados são encontrados na Tabela 6. Para os dois casos são aplicados incrementalmente deslocamentos  $\Delta = 0,005$ , e a trajetória no espaço de tensões é marcada a cada passo  $\Delta/10$ . O incremento de deslocamento utilizado é  $0,001\Delta$ .

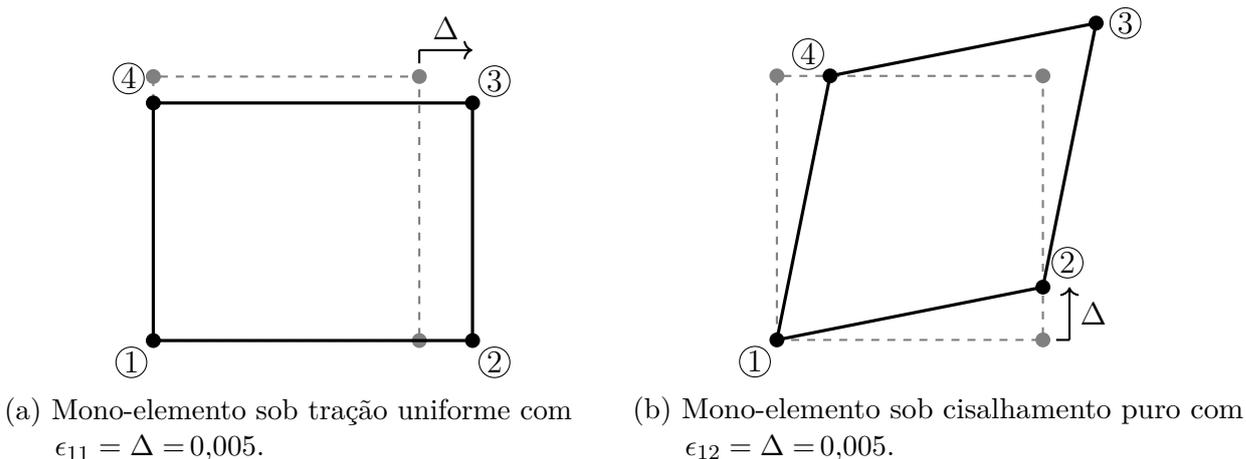


Figura 32 – Mono-elementos quadriláteros bilineares de 4 nós sob deslocamentos  $\Delta$ .

Para o caso elastoplástico perfeito, o mono-elemento sob tração uniforme é apresentado na Figura 33 e o mono-elemento sob cisalhamento puro na Figura 33 para orientação da

<sup>1</sup> Dada uma pequena perturbação em cada coordenada calculam-se os coeficientes de rigidez tangentes através da relação constitutiva.

rede cristalina em relação ao domínio dada pela rotação  $\varphi = 0^\circ$  (veja Equação 6.9). Para ambos os casos a superfície de plastificação foi atingida a partir do quinto passo de tempo marcado. Para o caso de tração uniforme os sistemas de deslizamentos 2 e 3 são ativos e para cisalhamento puro apenas o sistema 1 é ativo. Um quadro com o resumo da simulação é apresentado nas Tabelas 35 e 36 em função do passo de tempo.

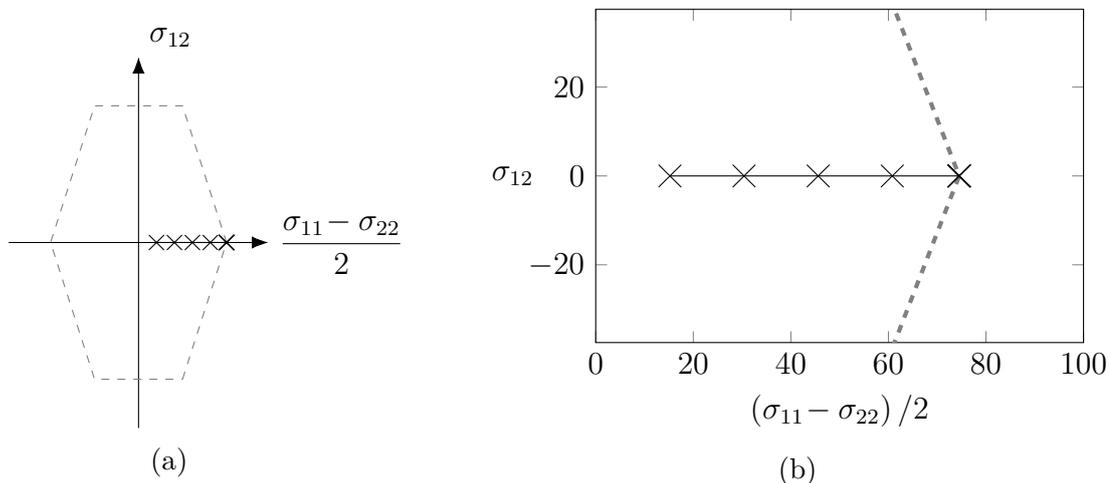


Figura 33 – Mono-elemento sob tração uniforme com  $\epsilon_{11} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001.  $\varphi = 0^\circ$ .

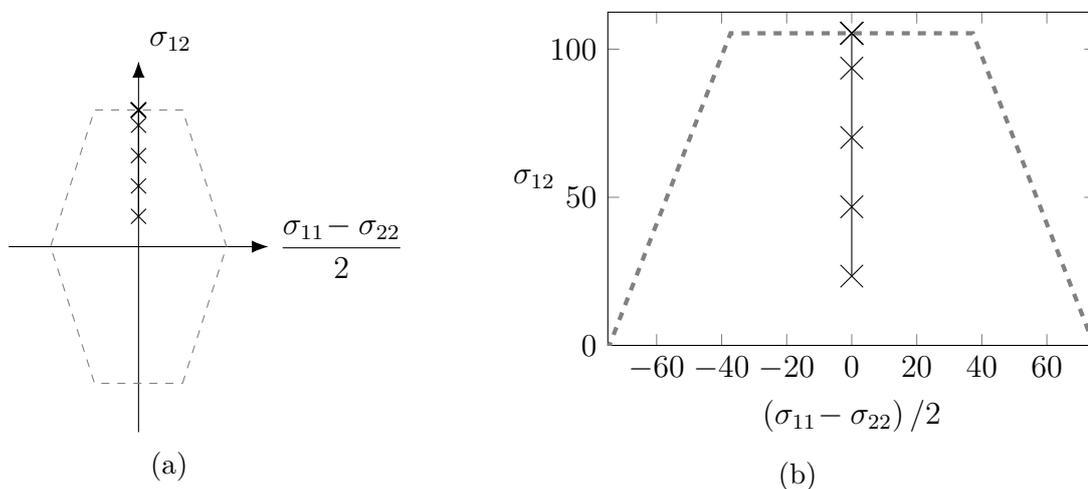


Figura 34 – Mono-elemento sob cisalhamento puro com  $\epsilon_{12} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001.  $\varphi = 0^\circ$ .

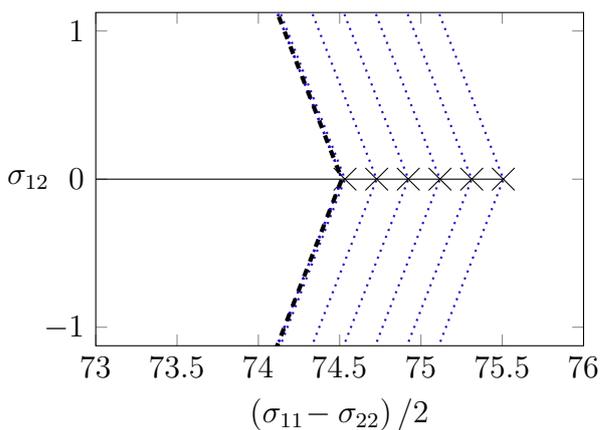
Na Figura 37 são apresentados os casos com endurecimento. Em todos os casos o estado de tensões permanece sobre a superfície de plastificação a cada passo de tempo. As leis linear e hiperbólica têm níveis de endurecimento praticamente iguais, enquanto que no material com endurecimento em lei de potência a variação da tensão crítica é menor.

| Passo | $\sigma_{11}$ | $\sigma_{22}$ | $\sigma_{12}$ | $\epsilon_{11}^p$ | $\epsilon_{22}^p$ | $\epsilon_{12}^p$ | $\gamma^{(1)}$ | $\gamma^{(2)}$ | $\gamma^{(3)}$ | $\tau_c^{(1)}$ | $\tau_c^{(2)}$ | $\tau_c^{(3)}$ |
|-------|---------------|---------------|---------------|-------------------|-------------------|-------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| 1     | 35,67         | 5,26          | 0             | 0                 | 0                 | 0                 | 0              | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 2     | 71,33         | 10,51         | 0             | 0                 | 0                 | 0                 | 0              | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 3     | 107           | 15,75         | 0             | 0                 | 0                 | 0                 | 0              | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 4     | 142,6         | 20,98         | 0             | 0                 | 0                 | 0                 | 0              | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 5     | 176,7         | 27,66         | -6,81e-06     | 3,141e-05         | -3,141e-05        | 1,455e-10         | 0              | 3,332e-05      | 3,332e-05      | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 6     | 197,1         | 48,05         | -6,81e-06     | 0,0003558         | -0,0003558        | 1,455e-10         | 0              | 0,0003774      | 0,0003774      | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 7     | 217,4         | 68,42         | -6,81e-06     | 0,00068           | -0,00068          | 1,455e-10         | 0              | 0,0007213      | 0,0007213      | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 8     | 237,8         | 88,78         | -6,81e-06     | 0,001004          | -0,001004         | 1,455e-10         | 0              | 0,001065       | 0,001065       | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 9     | 258,1         | 109,1         | -6,81e-06     | 0,001328          | -0,001328         | 1,455e-10         | 0              | 0,001409       | 0,001409       | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 10    | 278,5         | 129,4         | -6,81e-06     | 0,001652          | -0,001652         | 1,455e-10         | 0              | 0,001752       | 0,001752       | 105,4          | 70,25          | 70,25          |

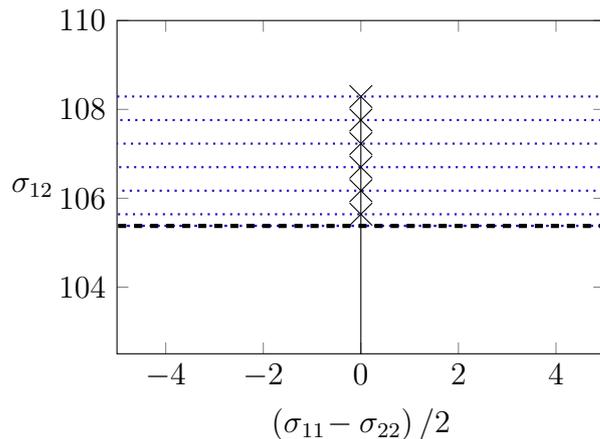
Figura 35 – Quadro de: mono-elemento de tração uniforme com  $\epsilon_{11} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Resumo para o nó 3 com incrementos de deslocamentos de  $0.001\Delta$ .  $\varphi = 0^\circ$ .

| Passo | $\sigma_{11}$ | $\sigma_{22}$ | $\sigma_{12}$ | $\epsilon_{11}^p$ | $\epsilon_{22}^p$ | $\epsilon_{12}^p$ | $\gamma^{(1)}$ | $\gamma^{(2)}$ | $\gamma^{(3)}$ | $\tau_c^{(1)}$ | $\tau_c^{(2)}$ | $\tau_c^{(3)}$ |
|-------|---------------|---------------|---------------|-------------------|-------------------|-------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| 1     | -0,01463      | -0,01463      | 23,4          | 0                 | 0                 | 0                 | 0              | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 2     | -0,0585       | -0,0585       | 46,8          | 0                 | 0                 | 0                 | 0              | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 3     | -0,1316       | -0,1316       | 70,2          | 0                 | 0                 | 0                 | 0              | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 4     | -0,234        | -0,234        | 93,6          | 0                 | 0                 | 0                 | 0              | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 5     | -0,3656       | -0,3656       | 105,4         | 0                 | 0                 | 0,0002483         | 0,0004967      | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 6     | -0,5265       | -0,5265       | 105,4         | 0                 | 0                 | 0,0007483         | 0,001497       | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 7     | -0,7166       | -0,7166       | 105,4         | 0                 | 0                 | 0,001248          | 0,002497       | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 8     | -0,936        | -0,936        | 105,4         | 0                 | 0                 | 0,001748          | 0,003497       | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 9     | -1,185        | -1,185        | 105,4         | 0                 | 0                 | 0,002248          | 0,004497       | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |
| 10    | -1,462        | -1,462        | 105,4         | 0                 | 0                 | 0,002748          | 0,005497       | 0              | 0              | 105,4          | 70,25          | 70,25          |

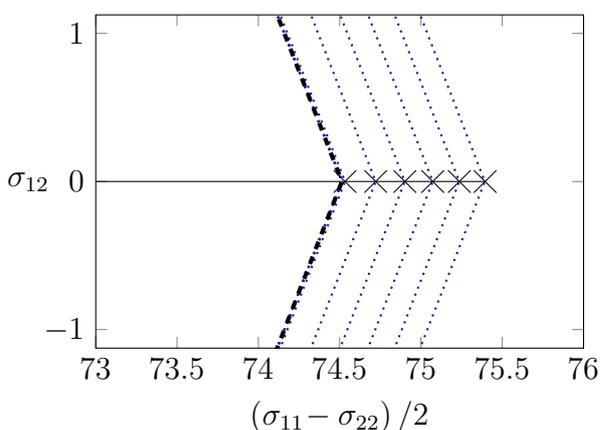
Figura 36 – Quadro de: mono-elemento sob cisalhamento puro  $\epsilon_{12} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Resumo para o nó 3 com incrementos de deslocamentos de  $0.001\Delta$ .  $\varphi = 0^\circ$ .



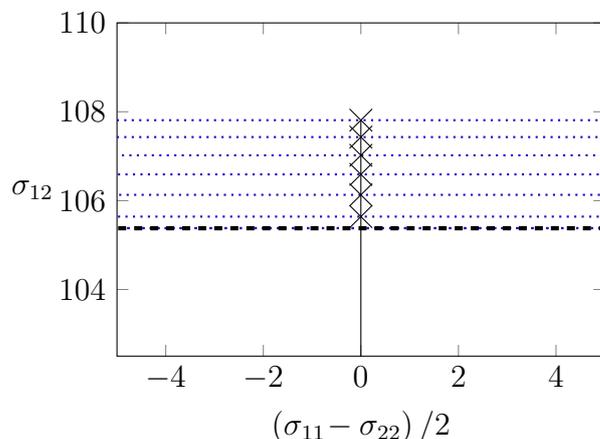
(a) Tração com endurecimento linear.



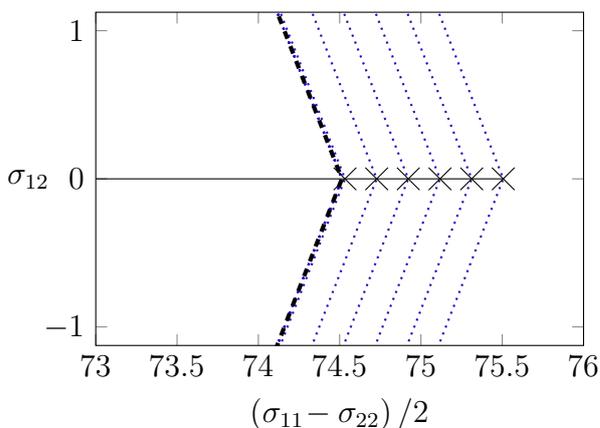
(b) Cisalhamento com endurecimento linear.



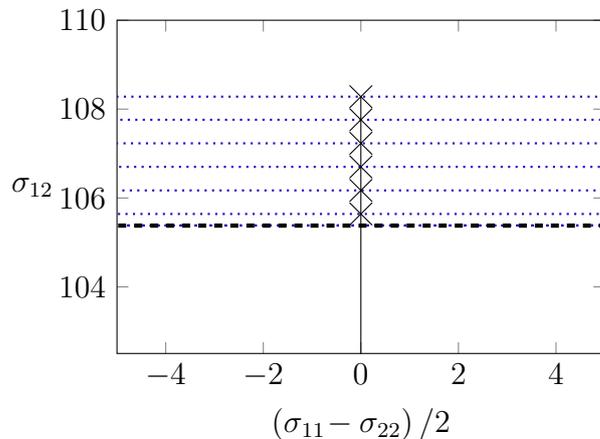
(c) Tração com endurecimento em lei de potência.



(d) Cisalhamento com endurecimento em lei de potência.



(e) Tração com endurecimento hiperbólico.



(f) Cisalhamento com endurecimento hiperbólico.

Figura 37 – Mono-elemento. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001.  $\varphi = 0^\circ$ .

### 7.2.1 Rotações $\varphi$

A trajetória no espaço de tensões para as orientações da rede cristalina em relação ao domínio das pelas rotações (veja Equação 6.9)  $\varphi = 30^\circ$  e  $\varphi = 45^\circ$  nas Figuras 38 e 39 respectivamente; os casos com endurecimento estão na Figura 40.

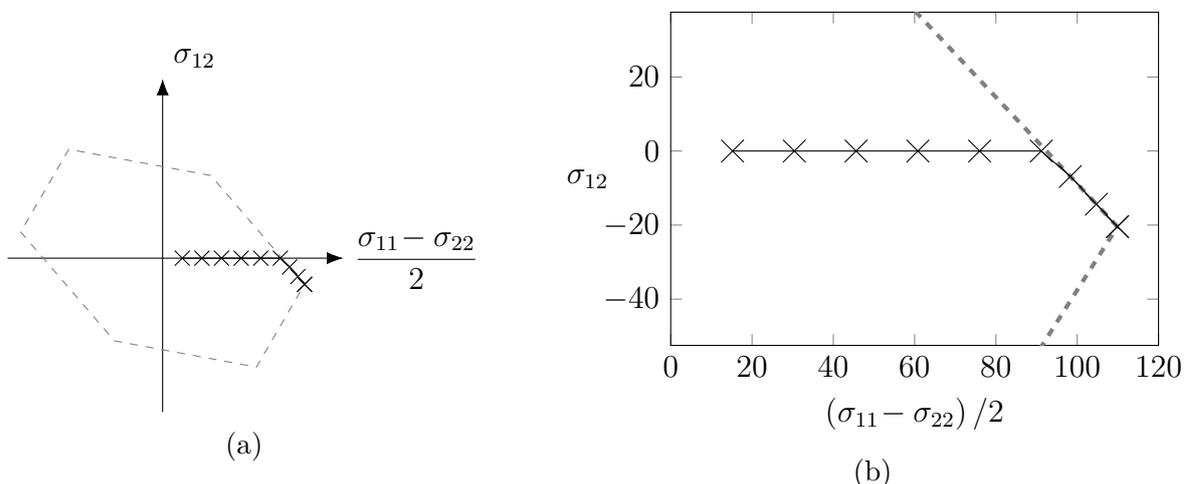


Figura 38 – mono-elemento. Tração uniforme ( $\epsilon_{11} = 0.005$ ). Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001.  $\varphi = 30^\circ$ .

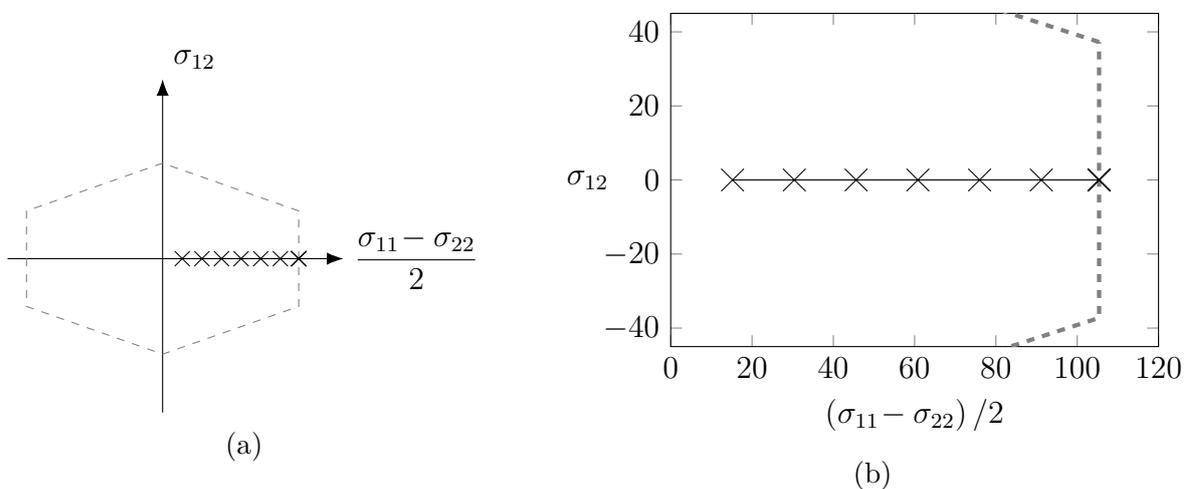


Figura 39 – Mono-elemento sob tração uniforme com  $\epsilon_{11} = 0.005$ . Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001.  $\varphi = 45^\circ$ .

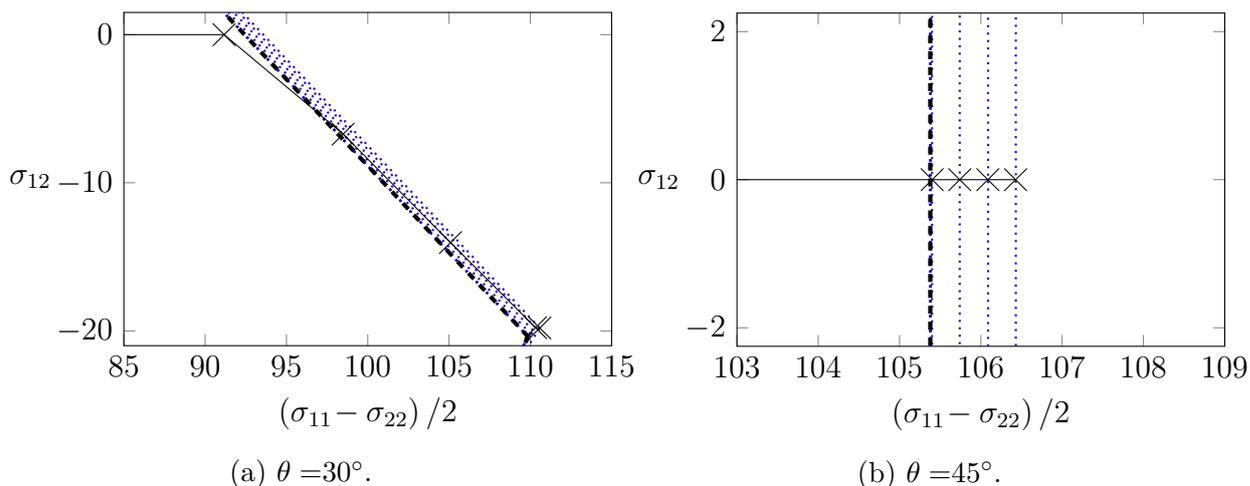


Figura 40 – Mono-elemento sob tração uniforme  $\epsilon_{11} = 0.005$ . Endurecimento linear. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.000.  $\varphi = 30^\circ$ .

Da mesma forma, as Figuras 41, 42 e 43 contemplam as trajetórias para cisalhamento puro.

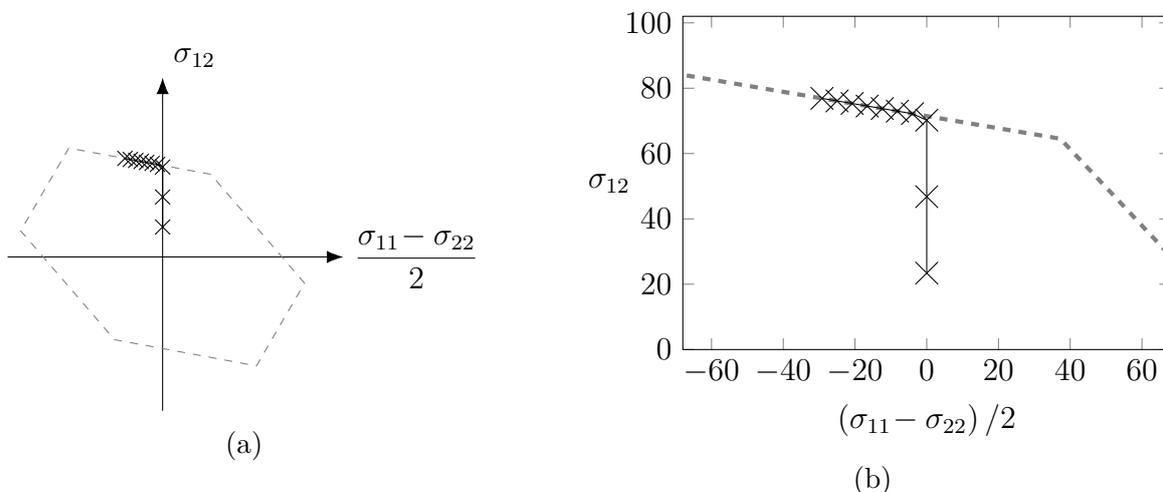


Figura 41 – Mono-elemento sob cisalhamento puro com  $\epsilon_{12} = 0.005$ ). Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001.  $\varphi = 30^\circ$ .

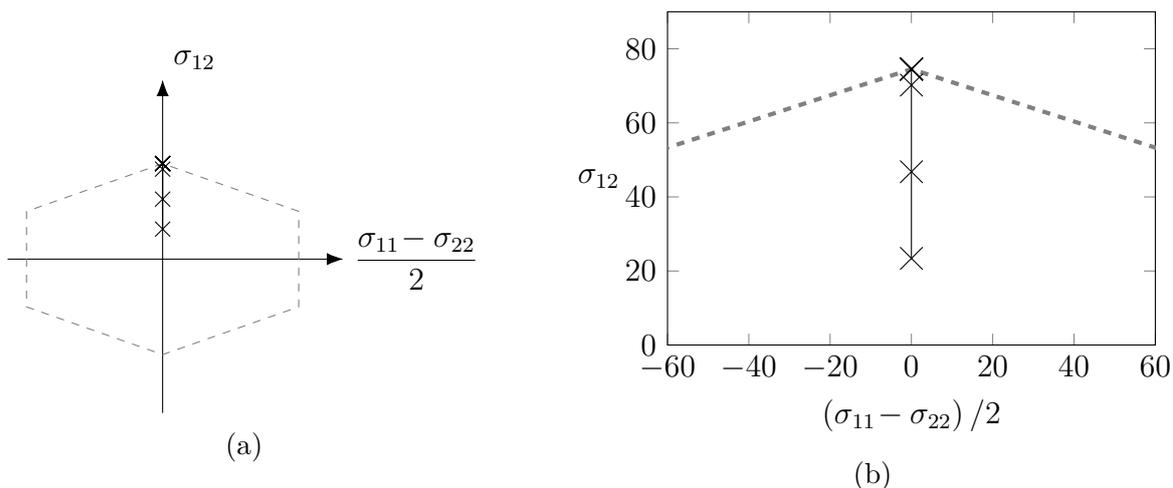


Figura 42 – Mono-elemento sob cisalhamento puro com  $\epsilon_{12}=0.005$ ). Cristal perfeitamente plástico. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.001.  $\varphi = 45^\circ$ .

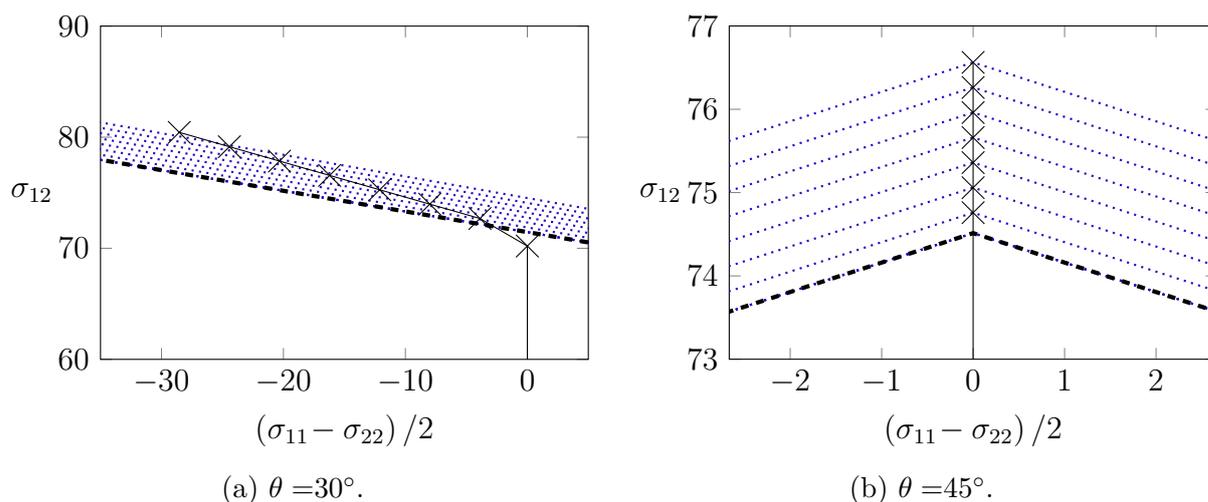


Figura 43 – Mono-elemento sob cisalhamento puro com  $\epsilon_{12}=0.005$ . Endurecimento linear. Trajetória no espaço de tensões para o nó 3 com passo de tempo igual a 0.000.  $\varphi = 30^\circ$ .

Para  $\varphi = 30^\circ$  e  $\varphi = 45^\circ$  é importante observar também que, após atingir a plastificação, o estado de tensões percorre a superfície de plastificação uma distância finita. Isto ocorre porque nestes casos a trajetória do estado de tensões, ao chegar à superfície de plastificação, forma um ângulo com a normal à superfície. Com a abordagem preditor-corretor adotada, o estado de tensões é obrigado a retornar ortogonalmente à superfície de plastificação após ultrapassá-la.

### 7.3 APLICAÇÃO A TRINCA EM MONOCRISTAL CFC

A fim de comparar o modelo numérico com o resultado analítico do problema aproximado de Rice é proposto um problema compatível com trinca sob tração. O problema consiste em um monocristal CFC de dimensões  $1000\mu m \times 1000\mu m$  sob EPD com uma trinca de  $500\mu m$  de comprimento, cuja ponta está situada no centro do domínio (ver o diagrama da Figura 44). São aplicados deslocamentos prescritos de  $0,625\mu m$  nos contornos superior e inferior.

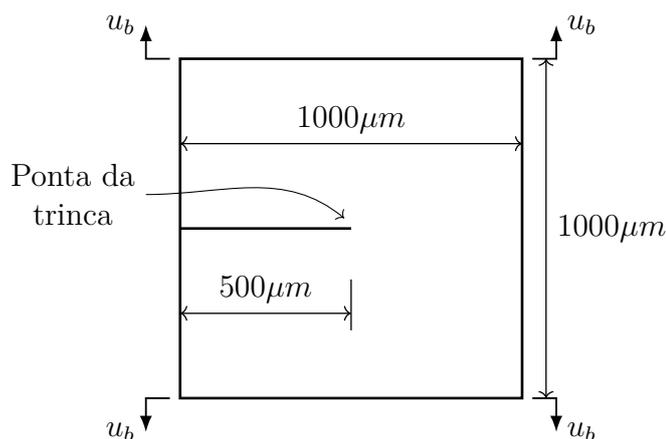


Figura 44 – Domínio físico do problema,  $1000\mu m \times 1000\mu m$ ;  $u_b$  denota o campo de deslocamentos impostos no contorno.

#### 7.3.1 Malha de elementos finitos

O domínio físico é discretizado considerando a simetria do problema. Adota-se uma malha de  $1000\mu m \times 500\mu m$  discretizada em 4476 elementos quadriláteros bilineares, como apresentado na Figura 45. Os deslocamentos prescritos são aplicados em 1000 passos de deslocamentos. A malha é similar a utilizada por Columbus e Grujicic (2002). Na Figura 46 é apresentado um detalhe da malha próximo à ponta da trinca. A ponta da trinca está inserida em uma região denominada *janela refinada*, de dimensões  $10\mu m \times 8,6\mu m$ , discretizada em  $50 \times 50$  elementos.

Os parâmetros para o material são  $\tau_c = 60,84\text{MPa}$ , módulo de elasticidade  $60840\text{MPa}$  e coeficiente de Poisson  $0,3$ , da ordem de valores utilizados em simulações numéricas (e.g. Columbus e Grujicic (2002) e Peirce, Asaro e Needleman (1982)). Os resultados para os campos de tensões e deformações na região da janela refinada são apresentados na Figura 47.

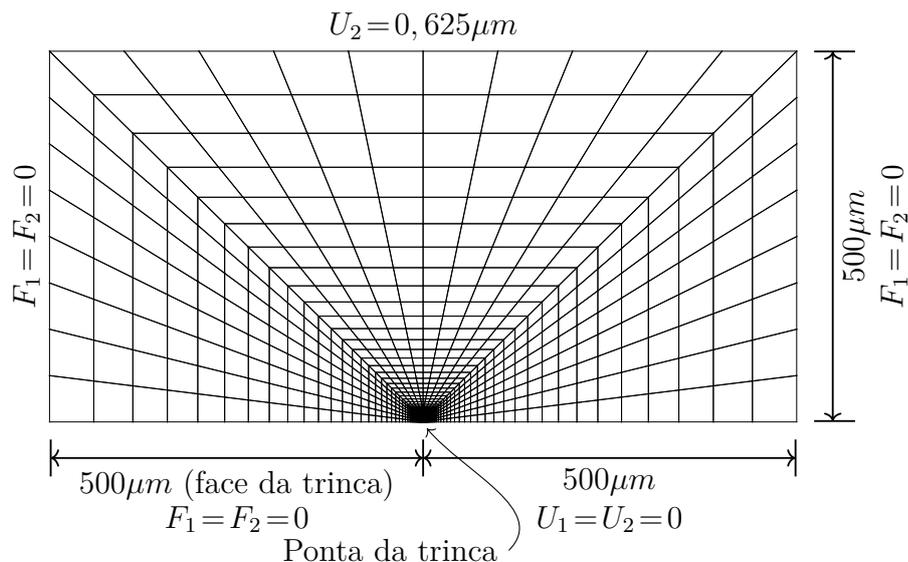


Figura 45 – Domínio computacional: malha e condições de contorno do problema.  $F_i$  e  $U_i$  são das componentes  $i$  do vetor de forças e vetor de deslocamentos respectivamente.

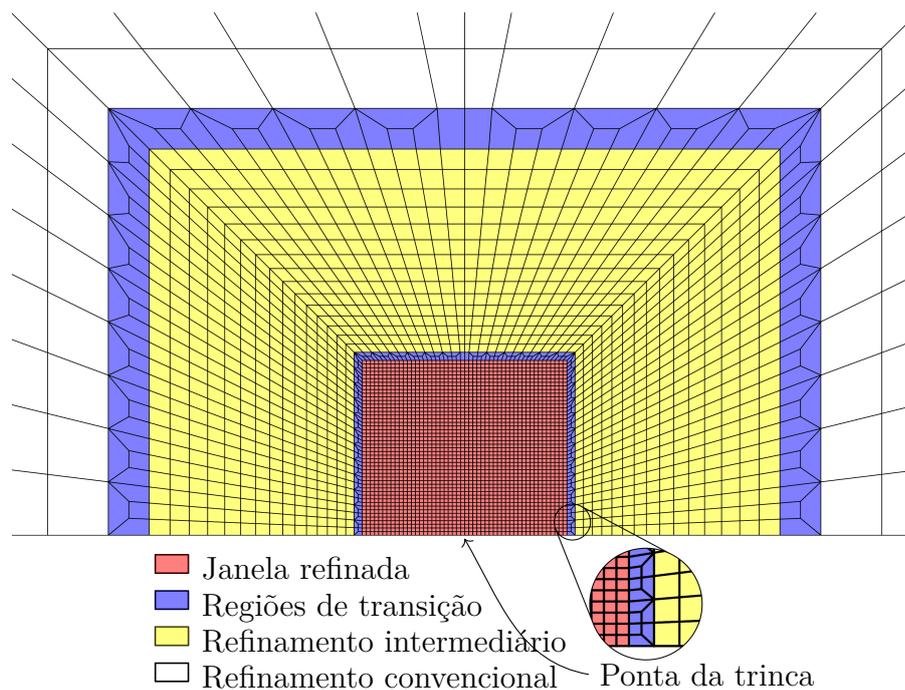


Figura 46 – Detalhe da malha próxima à ponta da trinca. A ponta da trinca situa-se no ponto médio da aresta da *janela refinada*.

## 7.4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Figura 47a é apresentado o campo para a pressão hidrostática, cujo valor é da ordem de três vezes o valor das componentes desviadoras das tensões. Percebe-se na Figura 47 a variação do estado de tensões com o raio em relação a ponta da trinca. Além disso, é observado um setor elástico na região próxima a face da trinca, concordando com os

resultados de Drugan (2001).

Analisando a variação das tensões para um mesmo raio (i.e. a Figura 48), os setores A e B de Rice nos resultados aqui apresentados são os quais há menor variabilidade dos valores para  $\sigma_{11}/\tau_c$  e  $\sigma_{22}/\tau_c$  e os setores A e C para  $\sigma_{12}/\tau_c$ . Portanto o setor A está bem definido no modelo numérico, e os setores B, C e D apresentam desvios maiores aos resultados analíticos.

Resultados numéricos apresentados em Cuitino e Ortiz (1993), Cleveringa, Giessen e Needleman (2000) e Columbus e Grujicic (2002) também apresentam certa dependência do raio, embora isto não seja mostrado de forma explícita como no presente trabalho. Tais referências também não empregam exatamente as mesmas condições usadas em Rice (1987), seja na abordagem (discordâncias discretas, modelos não locais, modelos em grandes deformações) ou seja no comportamento do material sobre deformação (modelos de endurecimento).

Em Rice (1987) é empregada uma aproximação na qual a dependência em  $r$  é eliminada nas equações de equilíbrio,

$$r \left( \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r} \right) e_i + \left( \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \theta} \right) e'_i = 0, \quad r \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \left( \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \theta} \right) e'_i = 0,$$

i.e., o termo  $\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r}$  é desprezado. Os resultados presentes neste trabalho sugerem que um estudo da influência de  $\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r}$  poderia ser interessante ao entendimento do campo de tensões na ponta da trinca.

Adicionalmente, os mapas de isovalores para os deslizamentos nos sistemas efetivos apresentados na Figura 49 têm boa concordância com a distribuição em setores obtida por Cuitino e Ortiz (1993) em simulações numéricas.

Fixando o raio de  $2,8\mu m$  e variando o ângulo em  $30^\circ$ ,  $70^\circ$ ,  $110^\circ$  e  $150^\circ$  a partir da ponta da trinca, os nós mais próximos destas coordenadas são 4315, 4507, 4539, 4521 respectivamente. São apresentadas na Figura 50 as trajetórias no espaço e tensões para os nós 4315, 4507, 4539, 4521, situados respectivamente nos setores A, B, C e D da Figura 26.

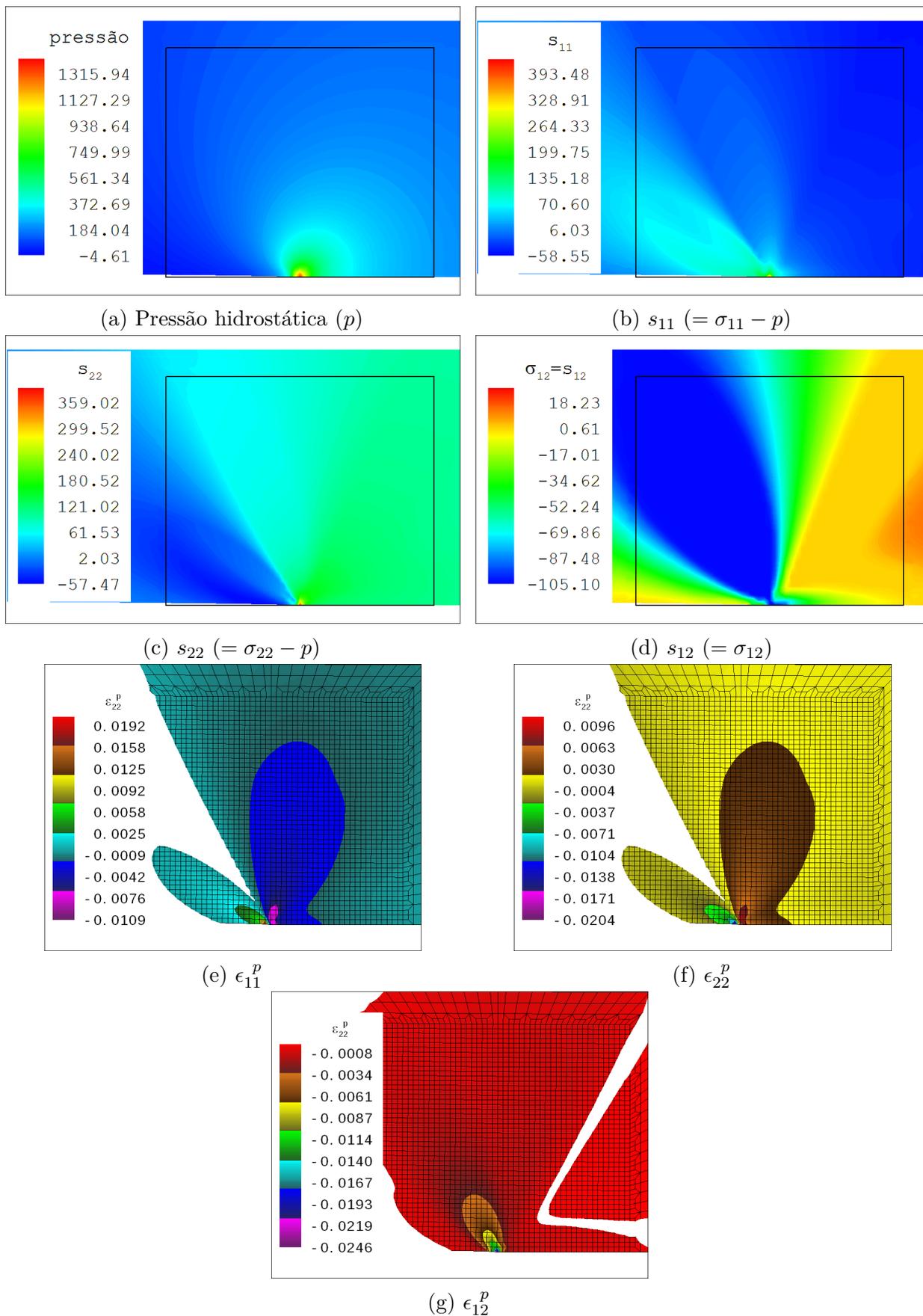


Figura 47 – (a)-(d) Campos de tensões na ponta da trinca; o retângulo delimita a janela refinada;  $s_{ij}$  são as componentes desviadoras das tensões. (e)-(g) Isovalores das componentes  $\epsilon_{ij}^p$  na janela refinada (zonas elásticas em branco).

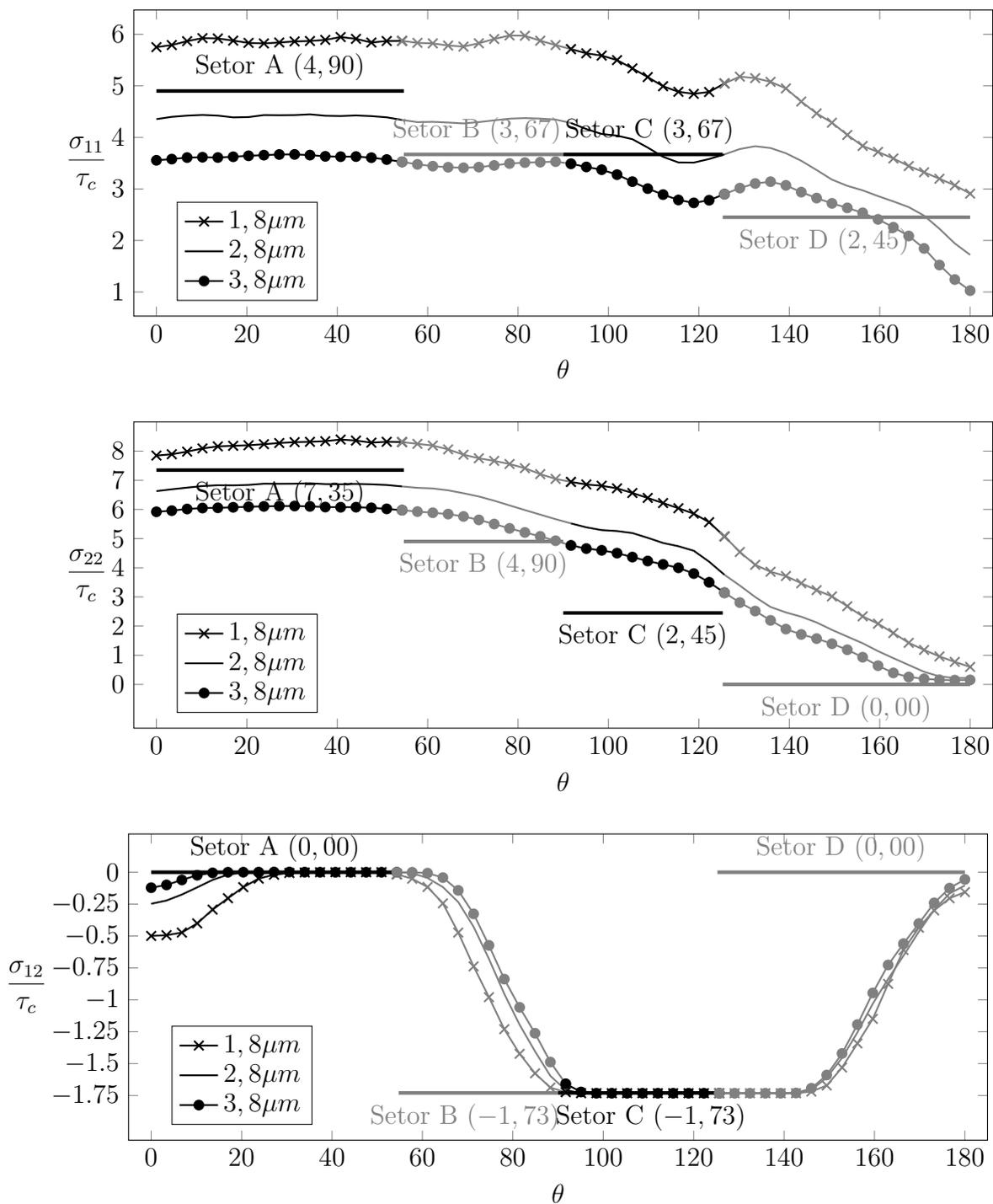


Figura 48 – Comparação das tensões obtidas na simulação numérica com os valores da Tabela 2 para os raios de  $1,8\mu m$ ,  $2,8\mu m$  e  $3,8\mu m$  a partir da ponta da trinca.

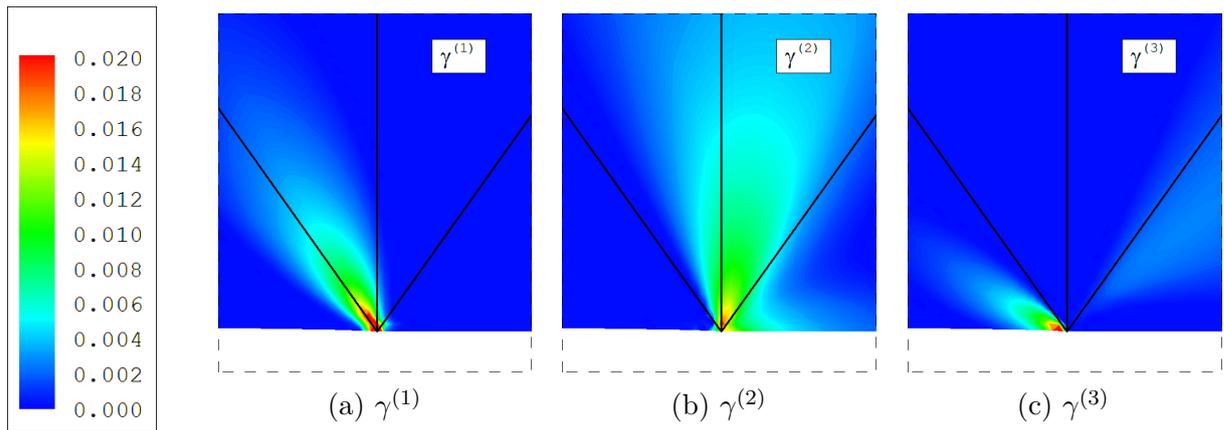


Figura 49 – Mapas de isovalores dos deslizamentos cristalinos para (a)  $\gamma^{(1)}$ , (b)  $\gamma^{(2)}$  e (c)  $\gamma^{(3)}$ .

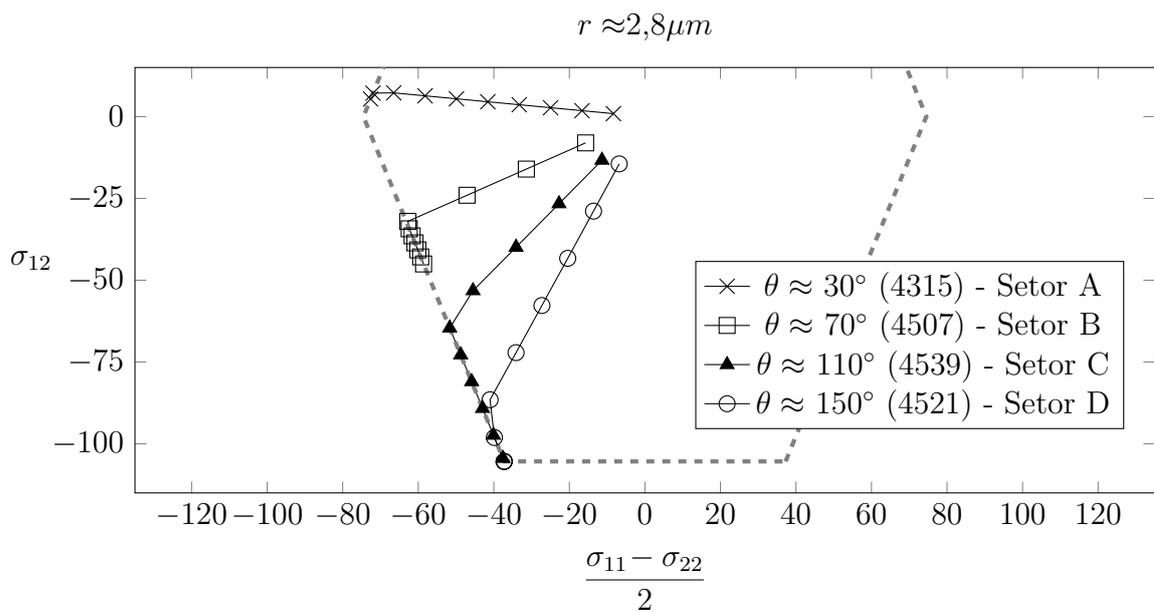


Figura 50 – Trajetória no espaço de tensões para os nós 4315 ( $r \approx 2,8\mu m$ ,  $\theta \approx 30^\circ$ , Setor A), 4507 ( $r \approx 2,8\mu m$ ,  $\theta \approx 70^\circ$ , Setor B), 4539 ( $r \approx 2,8\mu m$ ,  $\theta \approx 110^\circ$ , Setor C) e 4521 ( $r \approx 2,8\mu m$ ,  $\theta \approx 150^\circ$ , Setor D).

## 8 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi feita a implementação numérica de um modelo de plasticidade que incorpora a anisotropia da microestrutura cristalina dos metais. Foram considerados sistemas de deslizamento efetivos, que permitem a aplicação em casos EPD.

A invertibilidade e condicionamento da matriz constitutiva cristalina para valores dos parâmetros materiais pertencentes a uma faixa comumente encontrada na literatura que aborda o tema foi verificada, tendo sido concluído que para incrementos de deslizamentos pequenos a matriz é invertível e bem condicionada e para incrementos grandes, apesar de o número de condicionamento ser alto, ainda assim a solução do problema é possível.

Utilizou-se o método dos elementos finitos como ferramenta de discretização numérica do modelo de equações. Para verificação do cumprimento da equação constitutiva foram propostos modelos de mono-elementos sob estado uniforme de deformações, observando-se que o critério de escoamento é respeitado.

Ainda, para a validação do modelo numérico, foi proposto um modelo de trinca sob tração em monocristal CFC para comparação com as soluções analíticas de Rice (1987) e Drugan (2001) tendo-se observado que o modelo numérico aproxima-se da solução analítica para determinados valores do raio e do ângulo. As discrepâncias se devem em primeiro lugar porque os modelos não incorporam a dependência do raio na solução, uma vez que consideram a aproximação à ponta da trinca.

Em segundo lugar, Rice (1987) procura soluções nas quais há plastificação em todos os ângulos em torno da ponta da trinca. Com isso não incorpora diretamente a relação constitutiva elástica na solução; logo seus resultados valem para um cristal com comportamento rígido-plástico (isto também é observado por Cuitino e Ortiz (1993, p. 256)). Ora, desconsiderar a parcela elástica implica em desconsiderar o termo hidrostático.

Nas soluções obtidas o valor da pressão nos resultados numéricos é da ordem de três vezes o valor das componentes desviadores, afetando consideravelmente os valores dos campos com a variação do raio<sup>1</sup>. Além disso, como resolveu-se o problema numericamente, não foi feita a simplificação feita por Rice (1987) na equação de equilíbrio. Isto pode perfeitamente explicar a diferença em relação ao resultado analítico.

---

<sup>1</sup> Não há nenhuma razão *a priori* para a pressão hidrostática ser independente do raio.

Por fim cabe destacar que em algumas simulações numéricas encontradas na literatura (e.g. Cuitino e Ortiz (1993), Cleveringa, Giessen e Needleman (2000), Columbus e Grujicic (2002)), em que são validados modelos numéricos com os resultados analíticos de Rice (1987), as formulações utilizadas parecem incompatíveis com a formulação em elasto-plasticidade em pequenas deformações de Rice (1987), seja na abordagem (discordâncias discretas, modelos não locais, modelos em grandes deformações) ou seja no comportamento do material sobre deformação (modelos de endurecimento); isto limita a possibilidade de comparação entre os resultados. Ressalta-se que foi utilizada uma formulação compatível com a de Rice (1987), descrita no Capítulo 6.

## 8.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como sugestões para trabalhos futuros estão:

- Para estado plano de deformações, a verificação das condições de propagação de trincas em monocristais;
- Utilização de uma lei constitutiva visco-plástica, a fim de evitar a invertibilidade do sistema de equações;
- Implementação tridimensional dos modelos;
- Implementação de modelos de plasticidade cristalina não-local e modelo baseados em teoria de discordâncias.

## REFERÊNCIAS

- ASARO, R. J. Geometrical effects in the inhomogeneous deformation of ductile single crystals. *Acta Metallurgica*, Elsevier, v. 27, n. 3, p. 445–453, 1979.
- ASARO, R. J. Micromechanics of crystals and polycrystals. *Advances in applied mechanics*, Elsevier, v. 23, p. 1–115, 1983.
- ASARO, R. J.; RICE, J. Strain localization in ductile single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 25, n. 5, p. 309–338, 1977.
- BITTENCOURT, E. Numerical solution of crystal plasticity problems by a mixed formulation. *Computational Materials Science*, Elsevier, v. 63, p. 145–153, 2012.
- BITTENCOURT, E. Dynamic explicit solution for higher-order crystal plasticity theories. *International Journal of Plasticity*, Elsevier, v. 53, p. 1–16, 2014.
- BITTENCOURT, E.; NEEDLEMAN, A.; GURTIN, M. E.; VAN DER GIESSEN, E. A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 51, n. 2, p. 281–310, 2003.
- BOAS, W.; OGILVIE, G. The plastic deformation of a crystal in a polycrystalline aggregate. *Acta Metallurgica*, Elsevier, v. 2, n. 5, p. 655–659, 1954.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Numerical analysis. *Cengage Learning*, v. 9, 2010.
- BURGERS, J. Some considerations on the fields of stress connected with dislocations in a regular crystal lattice i. In: KONINKLIJKE NEDERLANDSE AKADEMIE VAN WETENSCHAPPEN. *Proceedings of the Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen*. [S.l.], 1934. v. 42, p. 293–378.
- CLEVERINGA, H.; GIESSEN, E. Van der; NEEDLEMAN, A. A discrete dislocation analysis of mode i crack growth. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 48, n. 6, p. 1133–1157, 2000.
- COLUMBUS, D.; GRUJICIC, M. A comparative discrete-dislocation/nonlocal crystal-plasticity analysis of plane-strain mode i fracture. *Materials Science and Engineering: A*, Elsevier, v. 323, n. 1, p. 386–402, 2002.
- CRONE, W.; SHIELD, T. Experimental study of the deformation near a notch tip in copper and copper–beryllium single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 49, n. 12, p. 2819–2838, 2001.
- CUITINO, A. M.; ORTIZ, M. Computational modelling of single crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, IOP Publishing, v. 1, n. 3, p. 225, 1993.
- DIETER, G. E. *Mechanical Metallurgy, Metallurgy and Metallurgical Engineering Series*. [S.l.]: McGraw-Hill, New York, 1976.
- DRUGAN, W. Asymptotic solutions for tensile crack tip fields without kink-type shear bands in elastic-ideally plastic single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 49, n. 9, p. 2155–2176, 2001.

- EWING, J. A.; ROSENHAIN, W. Experiments in micro-metallurgy: effects of strain. preliminary notice. *Proceedings of the Royal Society of London*, The Royal Society, v. 65, n. 413-422, p. 85–90, 1899.
- EWING, J. A.; ROSENHAIN, W. The crystalline structure of metals. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, A*, The Royal Society, v. 193, p. 353–375, 1900.
- FRENKEL, J. Zur theorie der elastizitätsgrenze und der festigkeit kristallinischer körper. *Zeitschrift für Physik*, Springer, v. 37, n. 7-8, p. 572–609, 1926.
- GOLINVAL, J. C. *Introduction to the mechanical design of aircraft engines - Jean Claude GolINVAL*. 2018. 11 out. 2018. Disponível em: <[http://www.ltas-cm3.ulg.ac.be/AERO0023-1/Conception\\_MecaTurbo\\_2014.pdf](http://www.ltas-cm3.ulg.ac.be/AERO0023-1/Conception_MecaTurbo_2014.pdf)>.
- GURTIN, M. E. A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 50, n. 1, p. 5–32, 2002.
- HILL, R.; RICE, J. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 20, n. 6, p. 401–413, 1972.
- HUTCHINSON, J. Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites. In: THE ROYAL SOCIETY. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. [S.l.], 1970. v. 319, n. 1537, p. 247–272.
- JOFFE, A. F.; LOEB, L. B. *Physics of crystals*. McGraw-Hill book company, inc., 1928.
- JUUL, K. J.; NIELSEN, K. L.; NIORDSON, C. F. Steady-state crack growth in single crystals under mode i loading. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 101, p. 209–222, 2017.
- KHAN, A. S.; HUANG, S. *Continuum theory of plasticity*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1995.
- KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. [S.l.]: LTC, 2006.
- KOCKS, U. The relation between polycrystal deformation and single-crystal deformation. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Springer, v. 1, n. 5, p. 1121–1143, 1970.
- KUBBINGA, H. Crystallography from haüy to laue: controversies on the molecular and atomistic nature of solids. *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*, International Union of Crystallography, v. 68, n. 1, p. 3–29, 2012.
- LANDAU, L.; AKHIEZER, A.; LIFSHITZ, E. *General Physics: Mechanics and Molecular Physics*. [S.l.]: Pergamon Press, 1967.
- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. *Course of theoretical physics. vol.7: Theory of elasticity*. Pergamon Press, 1986.
- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Course of Theoretical Physics. Vol.3: Quantum mechanics: non-relativistic theory*. [S.l.]: Pergamon Press, 1967.
- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Course of Theoretical Physics. Vol.5: Statistical Physics, Part 1*. [S.l.]: Pergamon Press, 1984.

- NIORDSON, C. F.; KYSAR, J. W. Computational strain gradient crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 62, p. 31–47, 2014.
- OROWAN, E. Zur kristallplastizität. i. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, Springer, v. 89, n. 9, p. 605–613, 1934.
- PEIRCE, D.; ASARO, R. J.; NEEDLEMAN, A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta metallurgica*, Elsevier, v. 30, n. 6, p. 1087–1119, 1982.
- PIERCY, G. R.; CAHN, R. W.; COTTRELL, A. H. A study of primary and conjugate slip in crystals of alpha-brass. *Acta Metallurgica*, Elsevier, v. 3, n. 4, p. 331–338, 1955.
- POLANYI, M. Über eine art gitterstörung, die einen kristall plastisch machen könnte. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, Springer, v. 89, n. 9, p. 660–664, 1934.
- RICE, J. Plane strain slip line theory for anisotropic rigid/plastic materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 21, n. 2, p. 63–74, 1973.
- RICE, J.; HAWK, D.; ASARO, R. Crack tip fields in ductile crystals. In: *Non-linear fracture*. [S.l.]: Springer, 1990. p. 301–321.
- RICE, J. R. Tensile crack tip fields in elastic-ideally plastic crystals. *Mechanics of Materials*, Elsevier, v. 6, n. 4, p. 317–335, 1987.
- RICE, J. R.; SAEEDVAFA, M. Crack tip singular fields in ductile crystals with taylor power-law hardening. i: Anti-plane shear. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 36, n. 2, p. 189–214, 1988.
- RICE, J. R.; WANG, J.-S. Embrittlement of interfaces by solute segregation. *Materials Science and Engineering: A*, Elsevier, v. 107, p. 23–40, 1989.
- SÓLYOM, J. *Fundamentals of the Physics of Solids: Volume 1: Structure and Dynamics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. v. 1.
- STEINMANN, P.; STEIN, E. On the numerical treatment and analysis of finite deformation ductile single crystal plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 129, n. 3, p. 235–254, 1996.
- TAYLOR, G. The mechanism of plastic deformation of crystals. part i. theoretical. In: THE ROYAL SOCIETY. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. [S.l.], 1934. v. 145, n. 855, p. 362–387.
- TAYLOR, G.; ELAM, C. The plastic extension and fracture of aluminium crystals. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society, v. 108, n. 745, p. 28–51, 1925. ISSN 0950-1207. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/108/745/28>>.
- TAYLOR, G. I.; ELAM, C. F. Bakerian lecture. the distortion of an aluminium crystal during a tensile test. In: THE ROYAL SOCIETY. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. [S.l.], 1923. v. 102, n. 719, p. 643–667.

VAN DER GIESSEN, E.; DESHPANDE, V. S.; CLEVERINGA, H. H. M.; NEEDLEMAN, A. Discrete dislocation plasticity and crack tip fields in single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Elsevier, v. 49, n. 9, p. 2133–2153, 2001.

VAN DER GIESSEN, E.; NEEDLEMAN, A. Micromechanics simulations of fracture. *Annual Review of Materials Research*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 32, n. 1, p. 141–162, 2002.

VOLTERRA, V. Sur l'équilibre des corps élastiques multiplement connexes. In: *Annales scientifiques de l'École normale supérieure*. [S.l.: s.n.], 1907. v. 24, p. 401–517.

## **Anexos**

# ANEXO A – TRANSFORMAÇÕES DE SIMETRIA, SISTEMAS CRISTALINOS E REDES DE BRAVAIS

## A.1 TRANSFORMAÇÕES DE SIMETRIA

O estudo da simetria de objetos físicos desempenha um papel importante na ciência natural. Muitas vezes, o conhecimento das características de simetria de um objeto é fator essencial na determinação de seu comportamento físico. As propriedades de simetria de objetos dependem de várias *transformações de simetria*. As transformações de simetria primitivas são rotação em torno de um *eixo de simetria*, reflexão em um *plano de simetria*, reflexão em um *centro de simetria* e rotação em torno de um *eixo de rotação-reflexão*, definidos como:

- Um objeto é dito ter um eixo de simetria de ordem  $n$ , representado por  $C_n$ , se sua configuração espacial não é modificada por uma rotação de ângulo  $2\pi/n$  radianos, com  $n = 2, 3, 4, \dots$ ;
- Um plano simetria de um objeto é o plano no qual após uma reflexão o objeto não é modificado; um plano de simetria é representado pelo símbolo  $\sigma$ . Quando referenciada a um eixo, a reflexão é representada por  $\sigma_h$  se for em um plano perpendicular ao eixo e  $\sigma_v$  se for em um plano que contém o eixo;
- Um objeto tem um centro de simetria  $i$  se para qualquer ponto  $A$  do corpo existe um outro ponto  $A'$  do corpo contido na reta que passa por  $A$  à mesma distância do centro  $i$  que  $A$ ;
- Um objeto tem um eixo de rotação-reflexão de ordem  $n$ , denotado por  $S_n$ , se sua configuração espacial não é modificada por uma rotação de ângulo  $2\pi/n$  radianos seguida por uma reflexão em um plano perpendicular ao eixo de rotação. A ordem deste elemento de simetria é sempre par, isto é,  $n = 2, 4, 6, \dots$

A Figura 51 apresenta exemplos de moléculas que possuem simetria conforme estes elementos básicos. As transformações de simetria de qualquer objeto podem ser descritas como combinações sucessivas das transformações primitivas. Porém, tais combinações em geral não comutam. Duas transformações importantes recebem uma nomenclatura especial: transformação identidade  $E$  resultado de sucessivas transformações que levam os objetos na

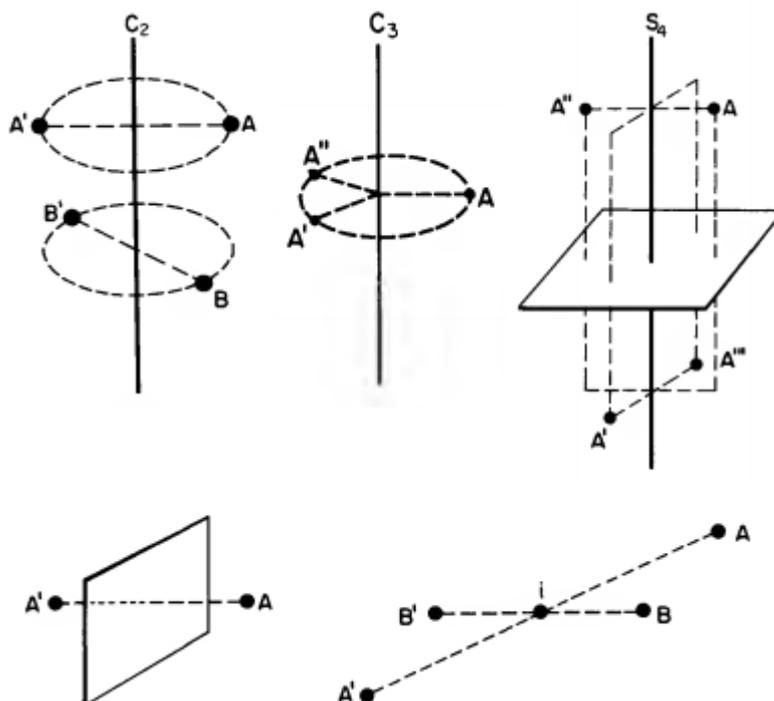


Figura 51 – Transformações de simetria em moléculas; eixo de simetria de ordem 2 (esquerda-acima), eixo de simetria de ordem 3 (centro-acima), eixo de rotação-reflexão de ordem 4 (direita-acima), plano de simetria (esquerda-abaxo) e centro de simetria (direita-abaxo). Fonte: Landau, Akhiezer e Lifshitz (1967, p. 116-117).

sua configuração inicial e a transformação inversão  $I$  que é uma rotação-reflexão de ordem 2. Chama-se *grupo de simetria* de um objeto o conjunto de todas as suas transformações de simetria e suas combinações.<sup>1</sup>

Mais precisamente, para objetos de dimensão finita (e.g. moléculas) as transformações pertencentes a um grupo de simetria devem ser tais que pelo menos um ponto do corpo permaneça fixo para que não ocorra translação do corpo. Grupos de simetria com essa propriedade são chamados de *grupos pontuais*. Ao contrário de corpos de dimensão finita, além destas transformações de simetria corpos cristalinos têm *simetria translacional* devido sua natureza periódica (considera-se que um cristal tem extensão infinita para fins de simetria).

Um cristal ideal é composto por uma repetição infinita de grupos idênticos de objetos denominados *base*. Cada base é associada a um ponto no espaço. O conjunto destes pontos forma uma *rede cristalina*. Pontos da rede que são feitos coincidir por alguma transformação de simetria são ditos *equivalentes*. A simetria translacional dos cristais proporciona ainda duas novas transformações, rotação em torno de um *eixo helicoidal*

<sup>1</sup> Formalmente, este conjunto deve satisfazer os axiomas da *teoria dos grupos*. Ou seja, deve existir uma operação associativa entre seus elementos, um elemento neutro e cada elemento deve possuir um simétrico.

e reflexão em um *plano de deslizamento-reflexão*. O primeiro elemento é a combinação de uma rotação em torno de um eixo de simetria e um deslocamento paralelo ao eixo; a segunda transformação é a combinação de uma reflexão em um plano de simetria e um deslocamento em uma direção contida neste plano.

## A.2 REDES DE BRAVAIS

Para uma rede cristalina tridimensional é possível definir vetores de translação da rede cristalina  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$  tais que a translação a partir de um ponto da rede definido pelo vetor posição  $\mathbf{r}$  é estabelecida pela equação

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad (\text{A.1})$$

com  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  inteiros, e leva a outro ponto da rede definido pelo vetor  $\mathbf{r}'$ . Se quaisquer dois pontos da rede cristalina satisfizerem a Equação A.1 (e suas condições) para um certo conjunto de vetores de translação, diz-se que a rede é *primitiva* e os vetores de translação são primitivos.

A escolha dos vetores primitivos não é única. De fato, quaisquer vetores de translação  $\mathbf{a}'_1$ ,  $\mathbf{a}'_2$  e  $\mathbf{a}'_3$  que satisfaçam as transformações

$$\mathbf{a}'_i = \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{a}_k$$

e

$$\mathbf{a}_i = \sum_k \beta_{ik} \mathbf{a}'_k$$

com  $\alpha_{ik}$  e  $\beta_{ik}$  inteiros também são vetores primitivos<sup>2</sup>. Geometricamente, os vetores primitivos definem um paralelepípedo chamado de *célula primitiva* ou *célula unitária*, cujo volume é invariante em relação à escolha dos vetores primitivos.

A rede cristalina pode ser considerada como uma justaposição de células unitárias, de mesmas propriedades e forma, e com mesmo número e disposição de átomos. É claro que aos vértices das células unitárias correspondem átomos idênticos de forma que tais pontos são equivalentes por operações de *translação*. O conjunto dos pontos de uma rede cristalina equivalentes por translação é chamado uma *rede de Bravais* do cristal. A cada um dos elementos da base do cristal correspondem redes de Bravais geometricamente idênticas relativamente deslocadas; logo cristais com base di ou poliatômica são formados por duas ou mais redes de Bravais interpenetrantes.

<sup>2</sup> Os determinantes  $|\alpha_{ik}|$  e  $|\beta_{ik}|$  são inversos, e como devem ser inteiros daí resulta que  $|\alpha_{ik}| = \pm 1$  é condição necessária e suficiente para que os  $\mathbf{a}'_i$  sejam primitivos.

### A.2.1 Sistemas cristalinos e redes de Bravais

Nesta seção são discutidas as possíveis propriedades de simetria das redes de Bravais. No entanto, primeiramente é discutido um resultado acerca da simetria rotacional.

Por questões geométricas só é permitido às redes de Bravais possuir algumas ordens de simetria rotacional. Landau e Lifshitz (1984) apresentam uma demonstração de quais ordens de simetria rotacional são possíveis, que é reproduzida a seguir.

Na Figura 52 sejam A e B dois pontos da rede feitos coincidir por uma translação  $a$  nos quais passam eixos de simetria perpendiculares ao plano do diagrama; com  $a$  o menor período de translação da rede. Realizando rotações de um ângulo  $\phi = 2\pi/n$ ,  $n$  a ordem do eixo, o ponto B é transportado para B' e o ponto A para A'.

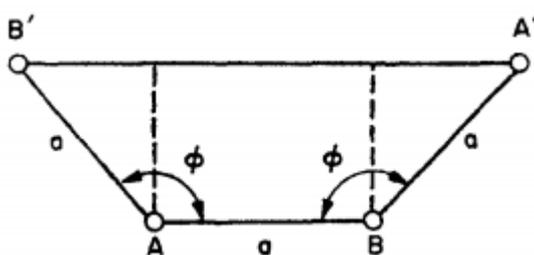


Figura 52 – Diagrama da simetria de redes cristalinas. Fonte: Landau e Lifshitz (1984, p. 405).

Como a distância entre A' e B' deve ser um período de translação de  $pa$ ,  $p$  inteiro positivo, logo

$$a + 2a \sin(\phi - \pi/2) = a - 2a \cos \phi = pa ,$$

ou  $\cos \phi = (1 - p)/2$ . Como  $|\cos \phi| \leq 1$ ,  $p$  somente pode assumir os valores 3, 2, 1 ou 0. Estes valores correspondem a  $n = 2, 3, 4$  ou 6. Então, a rede cristalina pode ter eixos de simetria somente de ordens 2, 3, 4 e 6.

São chamados de *sistemas cristalinos* os tipos de simetrias que um cristal pode ter *sob rotações e reflexões*. Ou seja, há uma correspondência entre os sistemas cristalinos e os grupos pontuais. É evidente que qualquer ponto de uma rede de Bravais é um centro de simetria próprio da rede, logo o menor grau de simetria que uma rede pode corresponder é a de um grupo pontual que contém somente a transformação de centro de simetria; este grupo é representado por  $C_i$  e o sistema correspondente é chamado de triclinico.

A partir do grupo pontual mais simples para as redes (o grupo  $C_i$ ) os sistemas cristalinos possíveis para as redes de Bravais são construídos adicionando-se mais elementos de simetria. Assim, ao todo existem 7 sistemas cristalinos, cada um correspondendo a um determinado grupo pontual: triclinico, monoclinico, ortorrômbico, tetragonal, trigonal, Implementação numérica de um modelo de plasticidade cristalina para estado plano de deformações e aplicação ao estudo de trinca em monocristal

hexagonal e cúbico. A cada sistema cristalino corresponde uma ou mais redes invariantes por translação, totalizando 14 redes de Bravais possíveis. As redes de Bravais são apresentadas no diagrama da Figura 54; a Tabela 7 apresenta o número de redes para cada sistema cristalino.

Neste trabalho é dada atenção especial ao sistema cúbico, representado por  $\mathbf{O}_h$ , o qual apresenta o maior grau de simetria. Este grupo é formado por 48 elementos divididos em 10 classes:  $E$  (transformação identidade), oito rotações  $C_3$  e  $(C_3)^2$ , seis rotações  $C_4$  e  $(C_4)^2$ , três rotações  $(C_2)^2$ , seis rotações  $C_2$ , I (inversão), oito rotações-reflexões  $S_6$  e  $(S_6)^5$ , seis rotações-reflexões  $C_4\sigma_h$ ,  $(C_4)^3\sigma_h$  em torno de eixos de quarta ordem, três reflexões  $\sigma_h$  em planos horizontais em relação a eixos de quarta ordem e seis reflexões  $\sigma_v$  em planos verticais em relação a esses eixos<sup>3</sup>. A posição destes elementos de simetria no sistema cúbico são apresentados nos diagramas da Figura 53.

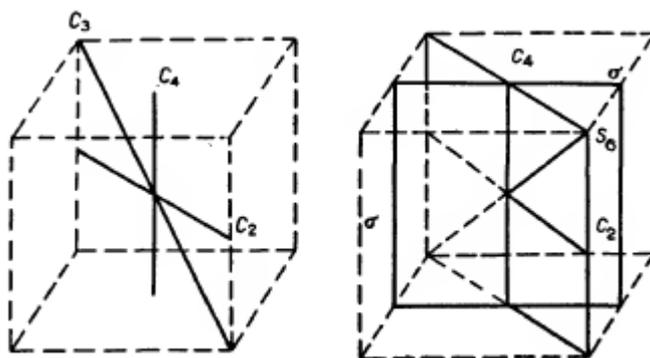


Figura 53 – Elementos de simetria de um sistema  $\mathbf{O}_h$ . Fonte: Landau e Lifshitz (1967, p. 345-346)

Um ponto a ressaltar é que para as 14 redes de Bravais apresentadas na Figura 54 os paralelepípedos apresentados não são em geral células primitivas (exceto para as redes mais simples); é o caso das redes CCC e CFC. A Figura 55 apresenta as células unitárias para as redes CCC e CFC.

Outra forma de classificar os sistemas cristalinos é através dos *parâmetros de rede*. Os módulos das dimensões das células convencionais para cada sistema,  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$ , juntamente com os ângulos formados dois a dois entre si,  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , constituem os parâmetros de rede. Em função dos parâmetros de rede cada rede é associada a um sistema cristalino. Na Tabela 7 é apresentado um resumo dos parâmetros de rede para cada sistema cristalino. O sistema cúbico é completamente caracterizado através de um único parâmetro de rede  $a$  que representa a dimensão das arestas da célula cúbica.

<sup>3</sup> Landau e Lifshitz (1967) e Landau e Lifshitz (1984)

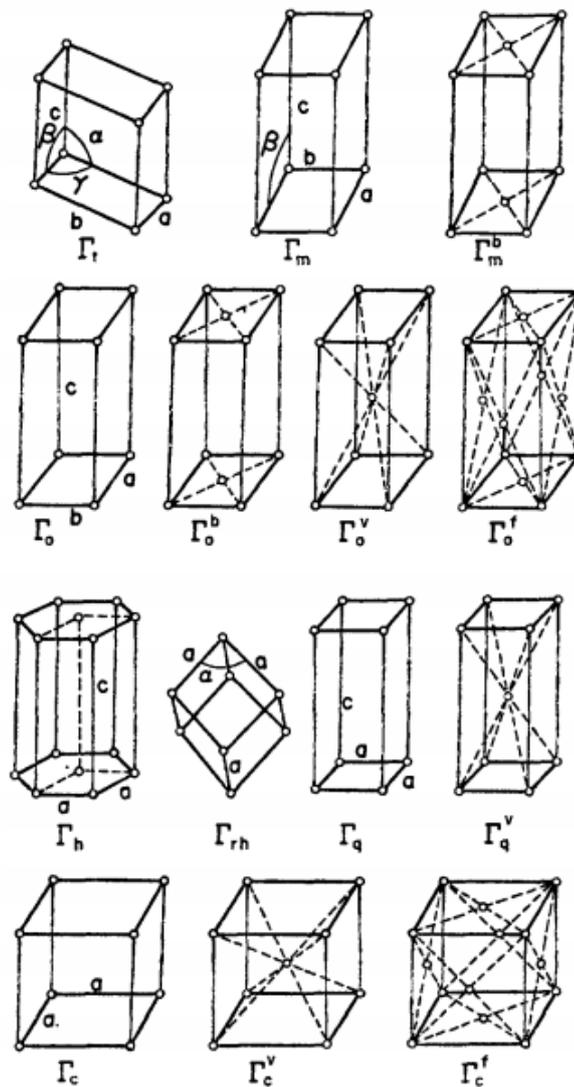


Figura 54 – As 14 redes de Bravais. Fonte: Landau e Lifshitz (1984, p. 406).

| Sistema      | Número de redes | Parâmetros de rede  |
|--------------|-----------------|---|
| Triclínico   | 1               | $a_1 \neq a_2 \neq a_3; \alpha \neq \beta \neq \gamma$                |
| Monoclínico  | 2               | $a_1 \neq a_2 \neq a_3; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$        |
| Ortorrômbico | 4               | $a_1 \neq a_2 \neq a_3; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$           |
| Tetragonal   | 2               | $a_1 = a_2 \neq a_3; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$              |
| Cúbico       | 3               | $a_1 = a_2 = a_3; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                 |
| Trigonal     | 1               | $a_1 = a_2 = a_3; \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$ |
| Hexagonal    | 1               | $a_1 = a_2 \neq a_3; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$   |

Tabela 7 – Número e parâmetros de redes para cada sistema cristalino. Fonte: Kittel (2006, p. 9).

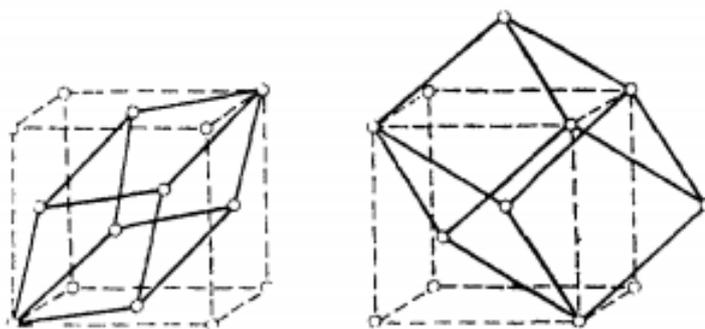


Figura 55 – Células unitárias das estruturas CCC e CFC. Fonte: Landau e Lifshitz (1984, p. 408).

### A.2.2 Propriedades macroscópicas e classes cristalinas

Em muitos fenômenos físicos o comportamento de cristais não depende explicitamente do arranjo dos átomos na rede mas da direção considerada no cristal, de maneira que pode ser considerado homogêneo e contínuo e sua estrutura interna desprezada; tais fenômenos são chamados de macroscópicos. A dependência da direção em propriedades macroscópicas de um corpo cristalino é chamada *anisotropia cristalina*.

Por outro lado, as simetrias cristalinas fazem com que as propriedades macroscópicas sejam exatamente iguais em algumas direções, ditas equivalentes. Simetrias translacionais levam à equivalência de direções, já que uma translação não afeta a simetria de direções no cristal. Logo, as diferenças entre eixos de rotação e eixos helicoidais e entre planos de reflexão e planos de deslizamento-reflexão também não afetam a simetria de direções. “Sendo assim, a simetria nas direções, e conseqüentemente as propriedades macroscópicas do cristal, são determinadas pelos seus eixos e planos de simetria, com eixos helicoidais e planos de deslizamento-reflexão tratados como eixos e planos ordinários. Conjuntos destes elementos de simetria em um cristal real são chamados de *classes cristalinas*” (LANDAU; LIFSHITZ, 1984, p. 409).

Como um cristal real pode ser descrito por um conjunto de redes de Bravais interpenetrantes, a simetria de um cristal real, por conta desta superposição, em geral é diferente da simetria da rede de Bravais correspondente. Além disso, é evidente que a introdução de pontos adicionais a uma rede de Bravais somente pode eliminar alguns de seus eixos e planos de simetria, porém não adicionar novos elementos. Logo a classe cristalina contém um número de elementos de simetria menor ou igual ao número de elementos da rede de Bravais do cristal. Há um número limitado de possíveis combinações de planos e eixos de simetria que podem descrever a simetria de direções em um cristal (32 combinações).

As classes cristalinas são então todos os grupos pontuais formados pelas combinações de

elementos de simetria de um dado sistema cristalino. Pode ser que ocorra de um mesmo grupo pontual ser obtido para sistemas cristalinos diferentes. Porém, cada classe deve ser atribuída ao sistema de menor simetria entre os que a contém; assim a ambiguidade é evitada. A necessidade de que esta condição seja cumprida é fisicamente evidente; é improvável que os átomos em um cristal sejam arranjados em redes de Bravais com simetria maior do que a exigida pela simetria do cristal, pois, se isto ocorrer, a mínima perturbação externa pode ser suficiente para destruir esta configuração já que não é imposta pela simetria do cristal. Como exemplo, se uma rede de Bravais cúbica ocorrer em um cristal pertencente a uma classe para a qual o sistema tetragonal é suficiente, uma interação muito pequena será capaz de distender ou encurtar uma das arestas da célula cúbica convertendo-a em um prisma quadrangular (LANDAU; LIFSHITZ, 1984, p. 410).

As classes cristalinas possíveis para um sistema cúbico são (ordenadas do menor grau de simetria para o maior):  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{T}_h$ ,  $\mathbf{T}_d$ ,  $\mathbf{O}$  e  $\mathbf{O}_h$ <sup>4</sup>. A classe de maior simetria,  $\mathbf{O}_h$ , é correspondente aos cristais cúbicos cuja base contém um único átomo.

---

<sup>4</sup> Os elementos de simetria de cada uma destas classes não serão comentados aqui, pois ficam fora do escopo deste trabalho. Uma discussão detalhada sobre os grupos pontuais os quais correspondem estas classes é feita por Landau e Lifshitz (1967, p. 338-347).